

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология, профиль Химическая технология высокомолекулярных соединений

Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Исследование условий формирования окраски после проведения аналитических реакций в среде полиметилметакрилата

УДК 678.744:335:543.41

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ6А	Уразов Эльдар Валентинович		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Гавриленко М.А.	д.х.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Криницына З.В.	к.т.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Король И.С.	к.х.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Бондалетова Л.И.	к.х.н.		

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
<i>Профессиональные компетенции</i>	
P1	Применять <i>глубокие</i> естественно-научные, математические и инженерные знания для создания <i>новых</i> материалов
P2	Применять <i>глубокие</i> знания в области современных технологий химического производства для решения <i>междисциплинарных</i> инженерных задач
P3	Ставить и решать <i>инновационные</i> задачи <i>инженерного анализа</i> , связанные с созданием материалов и изделий, с использованием системного анализа и моделирования объектов и процессов химической технологии
P4	Разрабатывать химико-технологические процессы, <i>проектировать</i> и использовать <i>новое</i> оборудование для создания материалов, конкурентоспособных на <i>мировом</i> рынке
P5	Проводить теоретические и экспериментальные <i>исследования</i> в области создания <i>новых</i> материалов, современных химических технологий, нанотехнологий
P6	Внедрять, <i>эксплуатировать</i> современные высокотехнологичные линии автоматизированного производства, обеспечивать их <i>высокую эффективность</i> , соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды
<i>Универсальные компетенции</i>	
P7	Использовать <i>глубокие</i> знания по <i>проектному менеджменту</i> для ведения <i>инновационной</i> инженерной деятельности с учетом юридических аспектов защиты интеллектуальной собственности
P8	<i>Активно</i> владеть <i>иностранным языком</i> на уровне, позволяющем работать в иноязычной среде, разрабатывать документацию, презентовать и защищать результаты инновационной инженерной деятельности
P9	Эффективно работать индивидуально, в качестве <i>члена и руководителя группы</i> , состоящей из специалистов различных направлений и квалификаций, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность <i>следовать корпоративной культуре</i> организации
P10	Демонстрировать <i>глубокие</i> знания <i>социальных, этических и культурных аспектов</i> инновационной инженерной деятельности, компетентность в вопросах <i>устойчивого развития</i>
P11	<i>Самостоятельно учиться</i> и непрерывно <i>повышать квалификацию</i> в течение всего периода профессиональной деятельности

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки специальность) 18.04.01 Химическая технология, профиль
Химическая технология высокомолекулярных соединений
Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
_____ Бондалетова Л.И.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации
(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ6А	Уразову Эльдару Валентиновичу

Тема работы:

Исследование условий формирования окраски после проведения аналитических реакций в среде полиметилметакрилата	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	№1300/С от 28.02.2017

Срок сдачи студентом выполненной работы:	05.06.2018 г.
--	---------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i>	Объектом исследования являются цветометрические модели формирования окраски прозрачных сенсоров из полиметилметакрилата, для спектрофотометрического и визуального определения с использованием мобильных технологий.
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i>	Литературный и патентный обзор Объекты и методы исследования Обсуждение результатов выполненной экспериментальной работы Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение Социальная ответственность Заключение по работе

Перечень графического материала	Презентация
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы (с указанием разделов)	
Раздел	Консультант
Исследование условий формирования окраски после проведения аналитических реакций в среде полиметилметакрилата	д.х.н., профессор Гавриленко М.А.
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	к.т.н., доцент Криницына З.В.
Социальная ответственность	к.х.н., доцент Король И.С.
Review of literature	ст. преподаватель Рыманова И.Е.
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	
На русском: Обзор литературы	
На английском: Review of literature	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	
---	--

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Гавриленко М.А.	д.х.н.		28.02.2017

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ6А	Уразов Э.В.		28.02.2017

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ6А	Уразову Эльдару Валентиновичу

Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	магистр	Направление	18.04.01 Химическая технология

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Вычислены материально-технические, энергетические, финансовые, информационные и человеческие затраты
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Нормы и нормативы по заработной плате исполнителей темы: коэффициент дополнительной заработной платы 12% от основной заработной платы, премиальный коэффициент к месячному окладу работника – 30% от заработной платы по тарифной ставке, коэффициент доплат и надбавок – 0,2, районный коэффициент для г. Томска – 1,3. Коэффициент накладных расходов 80%.
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Ставка отчислений на уплату во внебюджетные фонды для учреждений, осуществляющих образовательную и научную деятельность 27,1%.

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	
2. Разработка устава научно-технического проекта	
3. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	
4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Сегментирование рынка
2. Диаграмма Исикавы
3. Организационная структура проекта
4. Пример иерархической структуры проекта

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Криницына З.В.	к.т.н., доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ6А	Уразов Эльдар Валентинович		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ6А	Уразову Эльдару Валентиновичу

Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	магистр	Направление	18.04.01 Химическая технология

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<p><i>Объект исследования – полиметилметакрилат.</i></p> <p><i>Методика – изучение условий цветовой индикации при изменении внешних условий.</i></p> <p><i>Рабочая зона – лаборатория ТПУ.</i></p> <p><i>Область применения – химическая промышленность.</i></p>
--	--

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<p>1. Производственная безопасность</p> <p>1.1. Анализ выявленных вредных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности:</p> <ul style="list-style-type: none"> – физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой; – действие фактора на организм человека; – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты; – (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства). <p>1.2. Анализ выявленных опасных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности:</p> <ul style="list-style-type: none"> – механические опасности (источники, средства защиты); – термические опасности (источники, средства защиты); – электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты); – пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения). 	<p><i>1. Профессиональная социальная безопасность.</i></p> <p><i>1.1. Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования.</i></p> <p><i>1.2. Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть в лаборатории при проведении исследований.</i></p> <p><i>1.3. Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов.</i></p>
<p>2. Экологическая безопасность:</p> <ul style="list-style-type: none"> – защита селитебной зоны – анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); – анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы); – анализ воздействия объекта на литосферу (отходы); 	<p><i>2. Экологическая безопасность.</i></p> <p><i>2.1. Анализ влияния объекта исследования на окружающую среду.</i></p> <p><i>2.2. Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду.</i></p> <p><i>2.3. Обоснование мероприятий по защите окружающей среды.</i></p>

<ul style="list-style-type: none"> – разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды. 	
3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях: <ul style="list-style-type: none"> – перечень возможных ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения; – выбор наиболее типичной ЧС; – разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий. 	<p><i>3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях.</i></p> <p><i>3.1. Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований.</i></p> <p><i>3.2. Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть в лаборатории при проведении исследований.</i></p> <p><i>3.3. Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС.</i></p>
4. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<p><i>4. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.</i></p> <p><i>4.1. Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.</i></p> <p><i>4.2. Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.</i></p>

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
---	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Король И.С.	К.Х.Н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ6А	Уразов Эльдар Валентинович		

Реферат

Выпускная квалификационная работа 120 с., 20 рис., 32 табл., 62 источников, 1 прил.

Ключевые слова: полиметакрилатная матрица, оптод, спектрофотометрия, колориметрия, смартфон.

Объектом исследования являются цветометрические модели формирования окраски прозрачных сенсоров из полиметилметакрилата, для спектрофотометрического и визуального определения с использованием мобильных технологий.

Цель работы – разработка метода цветометрического определения концентраций аналитов в полиметакрилатной матрице (ПММ) с использованием смартфона.

В процессе исследования проведены:

- анализ патентной и научной литературы;
- изучение методов оценки окрашивания оптодов;
- сравнение цветометрического метода оценивания концентрации аналита со спектрофотометрическим и полуколичественным визуальным методами.

В результате исследования разработана методика цветометрического определения концентраций аналитов с использованием колориметрического сенсора на основе ПММ.

Степень внедрения: выполнена НИР.

Область применения: химическая промышленность.

Экономическая эффективность/значимость работы: проект эффективен.

Определения

В данной работе применены следующие термины с соответствующими определениями:

Сорбция: Поглощение твёрдым телом либо жидкостью различных веществ из окружающей среды.

Колориметрия: Физический метод химического анализа, основанный на определении концентрации вещества по интенсивности окраски растворов (более точно — по поглощению света растворами).

Спектрофотометрия: Физико-химический метод исследования растворов и твёрдых веществ, основанный на изучении спектров поглощения в ультрафиолетовой (200—400 нм), видимой (400—760 нм) и инфракрасной (>760 нм) областях спектра.

Нормативные ссылки

1. ГОСТ Р 1.5 - 2012 Стандартизация в Российской Федерации. Стандарты национальные Российской Федерации. Правила построения, изложения, оформления и обозначения.
2. ГОСТ 7.0.5 - 2008 Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Библиографическая ссылка.
3. ГОСТ 7.1 – 2003 Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Библиографическая запись. Библиографическое описание.
4. ГОСТ 7.9 - 95 Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Реферат и аннотация.
5. ГОСТ 7.11 - 2004 Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Библиографическая запись. Сокращение слов и словосочетаний на иностранных языках
6. ГОСТ 7.0.12 - 2011 Система стандартов по информации,

библиотечному и издательскому делу. Сокращения русских слов и словосочетаний в библиографическом описании произведений печати.

7. ГОСТ 8.417 - 2002 Государственная система обеспечения единства измерений. Единицы величин.

Обозначения и сокращения

ММА – метилметакрилат

ПММА – полиметилметакрилат

ПС – полистирол

ПЭТФ – полиэтилентерефталат

ПК – поликарбонат

ПВХ - поливинилхлорид

ПММ – полиметакрилатная матрица

ПЭГ – полиэтиленгликоль

ПБ - пероксид бензоила

ИТМ – ионы тяжелых металлов

Оглавление

1. Классификация химических сенсоров	15
1.1. Оптические материалы: общие сведения	15
1.1.1. Полимеры в качестве оптических сред	16
1.1.2. Полимерные сенсоры	17
1.1.3. Полиметилметакрилат	18
1.1.4. Полистирол	21
1.1.5. Поликарбонаты	22
1.1.6. Полиэтилентерефталат	23
1.1.7. Поливинилхлорид	24
1.2. Аналитическое применение химических сенсоров	26
1.3. Твердофазная спектроскопия	27
1.4. Цветометрические характеристики химических сенсоров. Системы координат, методы исследования цветности, яркости	29
1.4.1. Проблема метрологии цвета	29
1.4.2. Система спецификаций	30
1.4.3. Колориметрические системы	30
1.4.4. Расчет координат цвета и цветности	41
1.4.5. Цифровой анализ цвета	41
1.5. Использование новых технологий цветометрического анализа	43
2. Объект и методы исследования	57
2.1. Оптическая полимерная матрица	57
2.2. Оборудование и методы исследования	57
3. Цветометрическое исследование полимерных оптодов	63
4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	72

5.1. Предпроектный анализ.....	72
5.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования	72
5.1.2. Диаграмма Исикавы	73
5.1.3. Оценка готовности проекта к коммерциализации.....	74
5.1.4. Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования	75
5.2. Инициация проекта.....	76
5.2.1. Цели и результат проекта	76
5.2.2. Организационная структура проекта	77
5.2.3. Ограничения и допущения проекта.....	77
5.2.4. План проекта.....	78
5.3. Бюджет научного исследования.....	79
5.3.1. Накладные расходы.....	83
5.3.2. Организационная структура проекта	84
5.3.3. План управления коммуникациями проекта	84
5.3.4. Реестр рисков проекта	85
5.4. Оценка сравнительной эффективности исследования	87
6. Социальная ответственность	91
6.1. Вредные факторы	91
6.1.1. Характеристика рабочей зоны	91
6.1.2. Физические вредные факторы:	91
6.1.3. Химические вредные факторы:.....	92
6.2. Опасные факторы	94
6.2.1. Электробезопасность	94
6.2.2. Пожарная безопасность	95

6.3. Экологическая безопасность	96
6.3.1. Защита в чрезвычайных ситуациях	97
6.3.2. Технические меры по предотвращению возгорания	98
6.3.3. Выбросы и проливы химических веществ	99
6.4. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	99
Список использованной литературы.....	102
Приложение А	109

1. Классификация химических сенсоров

1.1. Оптические материалы: общие сведения

Оптические материалы предназначены для передачи или преобразования света в различных участках спектрального диапазона. Существуют три признака, отличающие оптический материал от любого технического материала. К ним относятся: 1) высокая однородность; 2) высокая прозрачность; 3) большой диапазон значений показателя преломления света и строгая их воспроизводимость для каждой марки материала, вне зависимости от места и времени его изготовления [1]. По назначению все оптические материалы можно условно разделить на две большие группы: 1) материалы для формирования оптического изображения и передачи световых потоков, несущих оптическое изображение, (материалы линзовой оптики) и для передачи световых потоков, несущих энергию излучения (материалы волоконной оптики). Материалы первой группы относятся к так называемым пассивным оптическим материалам в отличие от активных оптических материалов - материалов второй группы. Пассивные материалы (исторически первые оптические материалы) используются в качестве матриц, которые подвергаются химической или физической модификации (соответственно путем введения активаторов или направленного создания дефектов) при разработке активных материалов. 2) материалы для генерации световых потоков (лазерные материалы) и управления световыми потоками (фотохромные, электрохромные, электрооптические, магнитооптические и нелинейно-оптические материалы). Оптические материалы применяются в оптических системах приборов, оптоэлектронных устройствах, светотехнической и медицинской аппаратуре, бытовых приборах.

1.1.1. Полимеры в качестве оптических сред.

Преимущества и недостатки В качестве полимерных оптических сред используются в основном органические аморфные (линейные и сшитые) полимеры, находящиеся в стеклообразном состоянии. Оптические полимерные материалы включают органические стекла, литьевые термопласты, волокна, клеи и покрытия. Органическое стекло - техническое название прозрачных полимерных материалов на основе органических полимеров. К ним относятся полиметилметакрилат (ПММА) и другие поли(мет)акрилаты, полистирол, поликарбонаты, полимеры аллиловых соединений и другие. В промышленности под названием «органическое стекло» обычно понимают материал, получаемый полимеризацией метилметакрилата (ММА) в массе (блоке). Малая плотность, высокая ударопрочность и, кроме того, сравнительно низкая стоимость – это бесспорные преимущества полимерных изделий по сравнению с изделиями из неорганического стекла. Органическое стекло обладает хорошими диэлектрическими свойствами, а также отличается от силикатного стекла большими звуко- и теплоизолирующими способностями. Органические полимерные материалы отличаются термопластичностью - способностью при нагревании переходить в вязкотекучее состояние, а при охлаждении сохранять приданную им форму [2]. Основные недостатки, ограничивающие применение полимеров для изготовления оптических элементов, - температурный коэффициент расширения и температурный коэффициент показателя преломления, которые превышают названные показатели неорганических оптических стекол, а также сравнительно меньшая оптическая однородность [3]. Вместе с тем, технологичность и такое весьма ценное свойство полимеров, как возможность направленного регулирования структуры и свойств, открывает большие перспективы создания на их основе новейших типов оптических материалов. Оптические характеристики полимеров определяются их химическим строением и надмолекулярной

организацией, которая формируется в зависимости от условий получения и переработки полимерного материала. Оптические свойства полимеров характеризуют их взаимодействие со светом, которым называют электромагнитное излучение оптического диапазона, включающего УФ, видимую и ИК области спектра. К оптическим характеристикам, по которым оценивают пригодность различных полимеров для оптических целей, относятся: прозрачность, светопропускание (светопоглощение, светорассеяние), показатель преломления, дисперсия, оптическая однородность [3].

1.1.2. Полимерные сенсоры

Полимерные материалы используют в химии как матрицы для индикации различных соединений. Это необходимо по следующим причинам [4]. Наиболее часто применяются для оптических элементов такие материалы как ПММА, сополимеры ММА – ПС, ПС – САН, ПВХ, ПС, ПК, ПЭТФ, ПА, ПИ. Рассмотрено 5 видов наиболее применяемых оптических полимеров, это ПММА, ПС, ПВХ, ПК, ПЭТФ, которые обладают следующими характеристиками (таблица 1) [1].

Таблица 1 - Сравнительные физико – механические и эксплуатационные показатели некоторых полимеров

Показатель	ПММА	ПС	ПК	ПВХ	ПЭТФ
ρ , г·см ⁻³	1,18-1,19	1,05-1,10	1,20	1,18-1,3	1,36-1,4
σ_p , МПа	70-80	40-50	55-65	40-70	50-70
σ_c , МПа	100-120	80-110	75-85	60-160	80-120
E_p , МПа	2900	2800	2000	2600-4000	

Продолжение таблицы 1

Ударная вязкость кДж·м ⁻²	13-18	16	20	7-15	30
Твердость по шкале Мооса	2-3	2	2-3	2-3	2
Температурный коэффициент линейного расширения·10 ⁶ , °C ⁻¹	63-77	63-90	60-70	50-80	-
Теплостойкость По Мартенсу	87-92	70-80	115- 127		135-145
Теплопроводность Вт·см ⁻¹ , °C ⁻¹	0,19-0,21	0,09- 0,14	0,19	0,16- 0,19	0,14
ПТР г/10 мин	0,5-1,8	2,0- 8,0	2,0- 3,5	-	-
Водопоглощение, %	0,3	-	0,2	-	0,3

1.1.3. Полиметилметакрилат

Ведущая роль среди оптических (со)полимеров принадлежит ПММА $[-CH_2-C(CH_3)COOCH_3-]_n$ и сополимерам ММА. ПММА — продукт радикальной полимеризации ММА — аморфный полимер линейной структуры, относящийся к термопластам. Первым и основным полимером, используемым в оптике, ПММА является благодаря удачной совокупности свойств. Этот полимер превосходит большинство пластмасс исключительной прозрачностью, отличаясь светопропусканием в широком диапазоне, включающем УФ, видимую и часть ближней ИК - области спектра. В интервале длин волн $\lambda = 360-2000$ нм светопропускание ПММА 92%, как и у силикатного стекла. По светопрозрачности в видимой области спектра он

уступает кварцевому стеклу, пропускающему все 100% видимого света. Это обуславливает хорошую окрашиваемость ПММА во всевозможные цвета.

По способности пропускать УФ-излучение ПММА превосходит обычное силикатное стекло, несколько уступая кварцевому стеклу. Так, если кварцевое стекло пропускает 100% УФ-излучение, то ПММА 73,5%, тогда как силикатное стекло пропускает до 40%.

ММА относится к числу наиболее химически чистых продуктов, выпускаемых в промышленном масштабе. Обычный ПММА поглощает излучение в области длин волн менее 300 нм. При использовании полимера, полученного в атмосфере азота, поглощение смещается до 260 нм. Поскольку самые короткие солнечные лучи имеют длину волны $\lambda \approx 290$ нм, такой полимер является совершенно нечувствительным к действию солнечной радиации. Кроме того, он способен поглощать механические и звуковые колебания [3]. Влияние этерифицирующих групп на свойства полимера представлено в таблице 2.

Таблица 2 - Влияние этерифицирующих групп на свойства метакриловых полимеров

Этерификационная группа	ρ , кг·см ⁻³	σ_p , МПа	T_c , °C
Метильная	1,19	60	105
Этильная	1,11	35	65
н - пропильная	1,06	30	38
н- бутильная	1,05	7	33

Из данных (таблица 2) видно, что ПММА отличается от других гомополимеров метакрилатов более высокими прочностью при растяжении и теплостойкостью. Хороший комплекс физико-механических свойств ПММА сохраняется в диапазоне температур от -50 до 80 °C. По ударной вязкости ПММА значительно превосходит силикатное стекло, оптический ПС, несколько хуже ударопрочного ПС и уступает по этому показателю ПК.

ПММА инертен по отношению ко многим химическим реагентам: к щелочи, водным растворам неорганических солей, слабым кислотам, спиртам, воде, маслам и жирам, в том числе, к автомобильному топливу (таблица 3) [6].

Таблица 3 - Химическая стойкость ПММА

Вещество	Стойкость	Вещество	Стойкость
Ацетон	Р	Хлор	Н
Ацетилен	С	Хлорид калия	С
Петролейный эфир	С	Хлорид натрия	С
Этилацетат	Р	Хлороформ	Р
Дихлорэтан	Р	Ксилол	Р
Фенол	Р	Азотная кислота (10%, до 20°C, 14 суток)	С
Аммиак	С	Хромовая кислота (40% раствор)	Р
Амилацетат	Р	Фосфорная кислота (25%, 20°C, 14 суток)	С
Бензол	Р	Уксусная кислота (50%, 20°C, 14 суток)	Р
Бензин	С	Едкое кали	С
бутилацетат	Р	Сероводород	С
Диоксан	Р	Уксусный ангидрид	Р
Едкий натр	С	Машинное масло	С
Пероксид водорода (до 20%)	С	Трансформаторное масло	С
Соляная кислота (30%, до 60°C)	С	Толуол	Р
Спирты Бутиловый Изопропиловый Метиловый Этиловый	С Н Н Н	Фтористоводородная кислота	Н
		Царская водка	Р
		Цианистоводородная кислота	Р
		Октан	С
		Нефть	Н
Йод	Р	Нитробензол	Н

* Условные обозначения: С — стоек, Н — не стоек, Р — растворяется.

Воздействуют на него разбавленные фтористоводородные и цианистоводородные кислоты, концентрированные серная, азотная и хромовая кислоты, а также спирты. Растворителями ПММА являются хлорированные углеводороды (дихлорэтан, хлороформ), альдегиды, кетоны и сложные эфиры.

1.1.4. Полистирол

После ПММА вторым по прозрачности и распространенности среди органических стекол является ПС $[-CH_2-CH(C_6H_5)-]_n$. По прозрачности в видимой области спектра ПС приближается к ПММА, а по оптическим постоянным к флинту. Спектры пропускания ПС в УФ, видимой и ближней ИК областях спектра. при толщине образцов равной 0,1 и 2,0 мм интегральный коэффициент равен соответственно 89 и 88%.

Полистирол имеет высокую радиационную стойкость, а также обладает высокими водо- и морозостойкостью. Хорошо перерабатывается в виде расплава. При этом термоокислительная деструкция ПС начинается около 200 °С. К существенному недостатку ПС стоит отнести низкую атмосферостойкость. По данному показателю и по стойкости к механическим воздействиям ПС уступает ПММА. Под действием УФ света наблюдается снижение прозрачности и сильное пожелтение полимера, что практически исключает использование деталей из ПС на открытом воздухе. В закрытых же помещениях ПС применяется довольно широко. Расширение областей применения ПС как оптического материала требует совершенствования его свойств.

Стабилизация ПС осуществляется с помощью бензтриазолов и оксибензофенонов. Эффективными внутренними фотостабилизаторами ПС являются ациламино- и имидо- (нафтил)фенил(мет)акрилаты. Также в

качестве фотостабилизаторов предложены хелаты металлов – дикетонатные комплексы никеля, меди, кобальта [6].

1.1.5. Поликарбонаты

ПК это широко применяемые термопласты, обладающие уникальным сочетанием свойств: прозрачностью, высокой стойкостью к кислотам, щелочам и механическим воздействиям, термостойкостью, температурной стабильностью, хорошими электроизоляционными свойствами, биологической инертностью. ПК представляет собой сложные полиэфиры угольной кислоты и двухатомных фенолов. $[-OCRCOOR'O-]_n$ (рисунок 1) (R – остаток дикарбоновой кислоты, R' – остаток двухатомного фенола) из которых наибольшее практическое применение, в том числе в оптико – механической промышленности, имеют литейные ароматические полимеры и среди них – оптически прозрачный дифлон:

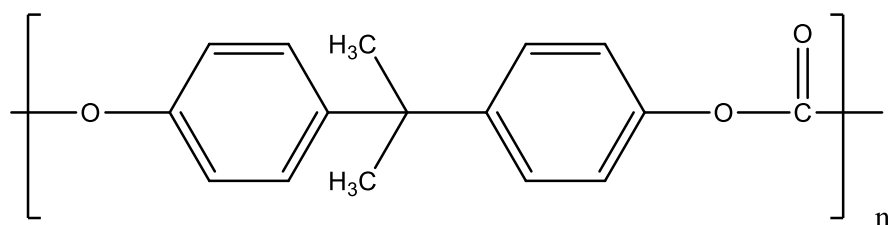


Рисунок 1 – Структурная формула дифлона

Дифлон получают межфазной поликонденсацией 2,2-бис(4-оксифенил)-пропана, называемого также дифенилолпропаном, дианом или бисфенолом А, и фосгена. Производство ПК этим методом имеет существенные недостатки, связанные с высокой токсичностью реагента, образованием побочных продуктов и необходимостью весьма тщательной очистки образующегося полимера от исходных реагентов и побочных продуктов. ПК имеет аморфную структуру, обладает относительно высоким показателем преломления ($n_D = 1.586$). По прозрачности несколько уступает

ПММА и ПС, так как имеет желтоватый оттенок ($\tau = 88-89\%$). Однако в отличие от ПММА и ПС он имеет более высокие ударопрочностные и теплостойкие характеристики. $T_{пл} = 220-270\text{ }^{\circ}\text{C}$. Высокоплавкий термопласт, ПК в расплавленном состоянии сохраняет стабильность при температурах до $320\text{ }^{\circ}\text{C}$. Для изделий из ПК характерна стабильность размеров, малая ползучесть, хорошая атмосферостойкость. Дифлон кроме того является стойким к воздействию УФ – света и излучений высокой энергии, а также трудногорючим. Основной недостаток – трудность формования изделий вследствие высокой вязкости расплава (превышает вязкость ПММА и ПС) и узкого температурного интервала переработки ($270 - 300\text{ }^{\circ}\text{C}$)

1.1.6. Полиэтилентерефталат

Полиэтилентерефталат – синтетический линейный термопластичный полимер, принадлежащий к классу полиэфиров. Продукт поликонденсации терефталевой кислоты и моноэтиленгликоля. Полиэтилентерефталат может эксплуатироваться как в аморфном, так и в кристаллическом состоянии. Аморфный полиэтилентерефталат – твердый прозрачный материал, кристаллический – твердый непрозрачный бесцветный. Степень кристалличности может быть отрегулирована отжигом при температуре между температурой стеклования и температурой плавления. Товарный полиэтилентерефталат выпускается обычно в виде гранулята с размером гранул 2-4 миллиметра.

Полиэтилентерефталат (рисунок 2) является продуктом поликонденсации терефталевой кислоты $(\text{OH})-(\text{CO})-\text{C}_6\text{H}_4-(\text{CO})-(\text{OH})$ и моноэтиленгликоля $(\text{OH})-\text{C}_2\text{H}_4-(\text{OH})$. В процессе поликонденсации образуется линейная молекула полиэтилентерефталата:

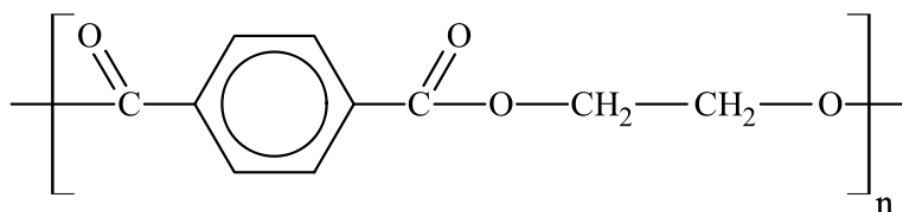


Рисунок 2 – Структурная формула ПЭТ

Молекулярная масса полиэтилентерефталата 20000-40000. Фениленовая группа C_6H_4 в основной цепи придает жесткость скелету молекулы полиэтилентерефталата и повышает температуру стеклования и температуру плавления полимерного материала. Регулярность строения полимерной цепи повышает способность к кристаллизации полиэтилентерефталата, которая в значительной степени определяет механические свойства готового изделия. Возможность управления кристалличностью полиэтилентерефталата существенно расширяет спектр его применения. Максимальная степень кристалличности неориентированного полиэтилентерефталата – 40-45%, ориентированного – 60-65%.

1.1.7. Поливинилхлорид

ПВХ $[-\text{CH}_2-\text{CHCl}-]_n$ – термопласт, получаемый суспензионной, эмульсионной или блочной полимеризацией винилхлорида, широко используемый для производства листов, пленок, волокна, труб и других изделий. Светопропускание ПВХ в видимой области спектра составляет 76 – 82 %, причем для пленки толщиной 151 мкм интегральный коэффициент τ может достигать 85%, $n_D^{25} = 1.54$ -1.56. Пониженная прозрачность ПВХ по сравнению с ПММА, ПК и ПС обусловлена системой пор. Пленки из ПВХ задерживают ИК-излучение на 90%. ПВХ также применяется для изготовления фильтров, задерживающих лазерное излучение [6].

Недостатком жестких прозрачных ПВХ является помутнение при эксплуатации в естественных условиях, что является следствием окислительного фотолиза полимера с выделением HCl как основного продукта распада. Для устранения помутнения ПВХ необходимо использовать стабилизирующие системы, продукты взаимодействия которых с HCl не являются гидрофильными соединениями.

Для получения прозрачного винипласта предложены синергические высокоэффективные стабилизирующие композиции на основе органических фосфитов, солей кадмия органической кислоты и изоцианатов триалкил(арил)олова. Из них наиболее эффективными оказались соединения $(C_6H_5 - CH_2)_3SnNCO$ и $(C_6H_5)_3SnNCO$. Стабилизирующая активность изоцианатов триалкил(арил)олова обусловлена их взаимодействием с HCl и сопряженными двойными связями макромолекул.

За низкую стойкость ПВХ по отношению к УФ-излучению ответственны карбонилаллильные группировки $-C(O)-CH=CH-$, разрушением которых при взаимодействии с различными реагентами можно существенно повысить фотостабильность полимера. при модифицировании ПВХ органическими фосфитами. При этом в результате полимераналогичных превращений в макроцепях ПВХ формируются новые группировки, блокирующие выше названные активные центры распада.

Частично дегидрогалогенизированный ПВХ (а также поливинилиденхлорид и поливинилбромид) можно использовать для создания поляризующих свет материалов, светопроницаемость которых составляет 70%. На основе сополимеров винилхлорида с винилацетатом получают фотохромные материалы.

По представленным выше характеристикам видно, что наиболее химически устойчивым и светопропускающим полимером является ПММА. Такие характеристики, как светопропускание и химическая устойчивость материала – основы для органического красителя будут оказывать влияние на методику, качество проводимых анализов [7].

1.2. Аналитическое применение химических сенсоров

Оптические химические сенсоры играют важную роль в промышленном, экологическом и клиническом мониторинге благодаря их низкой стоимости, возможности к миниатюризации и большой гибкости [8]. В различных производственных процессах требуется быстрое проведение анализа (например, при проверке состояния воды, химии энергетических установок, очистки воды и т.д.); в мониторинге окружающей среды; в биометрическом и биомедицинском анализе (для исследования, анализа крови на литиевые ионы, специфические белки, витамины и т. д.).

Среди всего многообразия химических сенсоров, цветометрические сенсоры наиболее привлекательны ввиду их способности определять (качественно или количественно) аналит через изменение собственной окраски. Цветометрические сенсоры позволяют получить визуальный и легко интерпретируемый аналитический сигнал, обеспечивают молекулярное или ионное распознавание вещества путем изменения своих оптических свойств в зависимости от аналита.. Спектрофотометрия поглощения является наиболее часто используемой методикой обнаружения в аналитических лабораториях из-за ее высокой гибкости и применимости к широкому спектру аналитических проблем.

Способность прозрачных сенсоров менять при взаимодействии с реагентом может быть также реализована в твердофазной спектрофотометрии и обеспечивает быстрое и визуальное определение веществ. Визуальное определение может быть оптимизировано с использованием различных средств цветовой обработки изображений компьютером, смартфоном или офисным сканером.

1.3. Твердофазная спектрометрия

Сущность заключается в комбинированном методе анализа, сочетающий концентрирование и прямое измерение светопоглощения аналита на поверхности сорбента. Твердофазная экстракция основана на выделении целевых компонентов в объеме твердого носителя, используя специфические взаимодействия образующегося в ходе реакции компонента (или мешающих его определению компонентов) с сорбентом, и применяется для подготовки, концентрирования проб различной природы перед их анализом. По сравнению с жидкостной экстракцией, которая является длительным и многоступенчатым процессом, требующим расхода большого количества особо чистых растворителей и реактивов, зачастую органической природы, а также дополнительного оборудования и трудозатрат, твердофазная экстракция более выгодная и экологичная.

Спектрофотометрический метод анализа основан на спектрально-избирательном поглощении монохроматического потока световой энергии при прохождении его через твердую фазу. Метод позволяет определять концентрации отдельных компонентов смесей окрашенных веществ, имеющих максимум поглощения при различных длинах волн, он более чувствителен и точен, чем, например, фотоэлектроколориметрический метод, так как многие соединения, часто органические, бесцветны. Спектрофотометрический метод анализа применим для измерения светопоглощения в различных областях видимого спектра, в ультрафиолетовой и инфракрасной областях, что значительно расширяет аналитические возможности метода. Таким образом, сочетание твердофазной экстракции и спектрофотометрического определения является перспективным направлением в аналитической химии.

В качестве твердой фазы могут выступать полимерные или неполярные сорбентные материалы, наиболее широко используются ионообменники на основе стирола, пенополиуретана, поливинилхлоридов, целлюлозные

мембраны, кремнеземы. Особо высоко ценятся оптически прозрачные материалы, так как прозрачность и бесцветность носителя облегчает визуальную и инструментальную оценку измерения окраски сенсора после контакта с исходным раствором. В связи с этим исследования ведутся в области создания прозрачных матриц, позволяющих сохранить как аналитические свойства иммобилизованных реагентов, так и оптические свойства исходной матрицы. Для получения окрашенного комплекса в твердой фазе или на поверхности сорбента используют один из трех подходов, которые зависят от природы анализируемого образца и комплексообразующего реагента:

1. Твердая фаза помещается в раствор образца вместе с комплексообразователем. Эта процедура рекомендуется, когда цветовая реакция является высокоселективной для анализируемого вещества, и образовавшийся продукт может быть сорбирован на твердой подложке.
2. Индикатор, ранее иммобилизованный в твердую фазу, добавляется к раствору образца. Применяется в случае, когда продукт не может быть непосредственно сорбирован из образца.
3. Аналит сначала сорбируется на твердую фазу из раствора, затем добавляют хромогенный агент. Применяется, когда хромогенный агент имеет слабую избирательность.
4. Для достоверного определения нескольких элементов в смеси одновременно целесообразно измерять светопоглощение на нескольких длинах волн, одна из которых соответствует максимальному поглощению окрашенного соединения, а при других светопоглощение отсутствует или мало, применяя для обработки спектров и определения количества веществ математические методы обработки информации с привлечением компьютерных ресурсов.

1.4. Цветометрические характеристики химических сенсоров. Системы координат, методы исследования цветоности, яркости

Метод цветометрии, заключающийся в расчете цветовых характеристик анализируемого объекта на основе имеющихся спектральных параметров, позволяет как различить спектрально близкие вещества, так и получить дополнительные сведения о них [9]. Цветометрические методы находят применение во многих отраслях промышленности для оценки цвета [10]. Во многих случаях цвет непосредственно связан с составом, технологическими свойствами, сортом того или промышленного продукта, поэтому предусмотрен ряд стандартов на определение цветности многих продуктов [11]. Для количественной интенсивности излучения создают и совершенствуют цветоизмерительные системы.

1.4.1. Проблема метрологии цвета

Процедура измерения цвета сводится к выражению его через какие-либо численные величины, которые определяют место данного цвета среди множества цветов, выраженных в некоторой системе. Вместе с измерением цвета метрология изучает вопросы его систематизации и математического описания. Главными требованиями, предъявляемыми к метрологии цвета, являются однозначность и воспроизводимость результатов. Однозначность подразумевает, что одна и та же величина должна всегда давать одинаковые численные значения, а воспроизводимость означает сопоставимость полученных результатов.

Колориметрия использует две основные системы измерения цвета.

- Система спецификаций представляет собой набор цветов (атлас), в котором выбирается цвет, тождественный воспроизводимому (измеряемому).

- Колориметрическая состоит в определении цветовых координат, то есть численных характеристик, по которым можно не только описать цвет, но и воспроизвести его. Примером ее реализации могут служить разнообразные цветовые модели.

1.4.2. Система спецификаций

Принципиально все системы спецификаций основаны на использовании набора эталонов, сведенных в цветовые палитры (таблицы), называемые атласом цветов. В них указываются также цветовые координаты определяемых цветов, то атласы можно считать также визуальным колориметром. Основными достоинствами атласов цветов являются их наглядность, компактность и простота использования. Недостатком является малая точность, обусловленная дискретным характером измерения и различием в спектральном составе источников освещения, при котором происходит сравнение цветов образца и атласа. Атласы цветов используются в тех случаях, когда нет необходимости в большой точности, а сам процесс измерения надо выполнить быстро и просто.

На практике часто требуется объективная и строгая оценка. Именно поэтому в дополнение к системам спецификаций созданы колориметрические системы, позволяющие с помощью математических зависимостей определять степень различия между цветами.

1.4.3. Колориметрические системы

Для корректного измерения цвета необходимо создание специальных цветовых моделей, обеспечивающих однозначность и воспроизводимость результатов измерений. Можно обойтись без использования цветовых моделей. Для этого потребовалось измерять, хранить и воспроизводить не цвет объекта, а полный его спектр (таблица 4). Современные приборы для

измерения спектрального состава света, спектрофотометры, становятся все доступнее, реализовать эту возможность пока практически невозможно по причине хранения спектральных распределений из-за финансовых соображений.

Таблица 4 - Соответствие между спектральным составом излучения и воспринимаемым нами цветом

Интервал длин волн, нм	Цвет поглощенного излучения	Наблюдаемый цвет (дополнительный)
400 – 450	Фиолетовый	Желто-зеленый
450 – 480	Синий	Желтый
400 – 550	Сине-зеленый	Оранжевый
500 – 560	Зеленый	Красно-пурпурный
400 – 610	Сине-зелено-желтый	Красный
450 – 650	Зелено-желто-красный	Пурпурный
625 – 750	Красный	Сине-зеленый

Для решения этой проблемы предложены два варианта аппаратно независимых колориметрических моделей:

1. цветовая система RGB МКО (или просто модель RGB МКО);
2. цветовая модель XYZ.

В цветовых моделях для описания цвета используется трехмерная система координат. Она образует цветовое пространство, в котором цвет можно представить в виде точки с тремя координатами. Для оперирования цветом в трехмерном пространстве выведены три фундаментальных закона:

1. Трехмерность природы цвета. Глаз реагирует на три различные цветовые составляющие. Примеры:
 - красный (R), зеленый (G) и синий (B) цвета;
 - цветовой тон (доминирующая длина волны), насыщенность (чистота) и яркость (светлость).

2. Четыре цвета всегда линейно зависимы, то есть:

$$cS = r * R + g * G + b * B \quad (1)$$

где $c, r, g, b \neq 0$ - весовые коэффициенты для каждой из составляющих цвета. Для смеси двух цветов $(cS)_1$ и $(cS)_2$ имеет место равенство:

$$(cS)_1 + (cS)_2 = (r * R)_1 + (g * G)_1 + (b * B)_1 + (r * R)_2 + (g * G)_2 + (b * B)_2 \quad (2)$$

которое свидетельствует о том, что цвет смеси излучений S зависит только от их цвета, но не от спектрального состава. Следствие: если цвет S_1 равен цвету S и цвет S_2 тоже равен цвету S , то следует, что цвет S_1 равен цвету S_2 независимо от структуры спектров энергии цветов S, S_1 и S_2 .

3. Цветовое пространство непрерывно. Если в смеси трех цветов один непрерывно изменяется, а другие остаются постоянными, то цвет смеси будет меняться непрерывно.

Цветовая система RGB МКО представляет цветовую модель, полученную путем выбора в качестве линейно независимых цветов трех монохроматических: красного R ($\lambda = 700$ нм, легко выделяемый красным светофильтром из спектра лампы накаливания); зеленого G ($\lambda = 546,1$ нм - линия е в спектре ртутной лампы); синего B ($\lambda = 435,8$ нм - линия д в спектре ртутной лампы). График цветового охвата в данной системе приведен на рис.3. Здесь точка S_1 отвечает цвету, входящему в это цветовое пространство, а S_2 - цвету, выходящему за его пределы. Такое представление удобнее проиллюстрировать геометрически. Три основных цвета в ортогональной системе координат являются осями, а каждый цвет, заданный тремя цветовыми координатами, отображается вектором S (рис.3),

$$cS = r * R + g * G + b * B; \quad (3)$$

где R, G, B – координаты красного, зеленого и синего цветов соответственно;
 R, G, B – единичные векторы этих смешиваемых цветов.

Соединив точки единичных основных цветов ($R=1, G=1, B=1$) друг с другом, получим треугольник, лежащий в единичной плоскости. Данная плоскость примечательна тем, что цветовые векторы, имеющие различную длину, но одинаковое направление, пересекают ее в одной и той же точке S , характеризующей насыщенность цвета. Чтобы установить положение точки S на единичной плоскости, вводят координаты цветности r, g, b , которые связаны с координатами цвета R, G, B следующим образом:

$$r = \frac{R}{(R+G+B)}; g = \frac{G}{R+G+B}; b = \frac{B}{(R+G+B)}; \quad (4)$$

Из соотношения (4) следует, что $r + g + b = 1$, т.е. для однозначного определения положения точки на единичной плоскости достаточно двух координат цветности.

Восприятие цвета человеком учитывают по результатам экспериментов со смешением цветов. В этих экспериментах требуется зрительно уравнивать чистые спектральные цвета одинаковой интенсивности (соответствующие монохроматическому свету с различными длинами волн) со смесями трех основных цветов, которые дает аналитический прибор (рисунок 3).

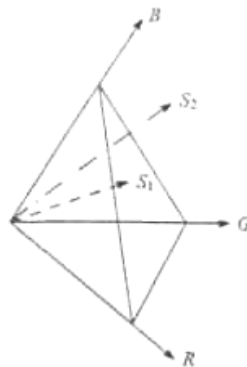


Рисунок 3 - Трехкоординатное цветовое пространство RGB

Для сопоставления чистый спектральный цвет и смесь трех цветов прибора располагают рядом на двух половинках фотометрического поля сравнения. После уравнивания измеряют количества трех основных цветов и определяют их отношения к единичным количествам этих цветов. Полученные величины являются цветовыми координатами уравниваемого цвета в выбранной цветиметрической системе координат. Описанная процедура не позволяет уравнивать большинство чистых спектральных цветов со смесями трех основных цветов прибора. В таких случаях к уравниваемому цвету добавляют некоторое количество одного из основных цветов, т.е. допускается отрицательное значение координаты цвета [12]. По результатам нескольких наблюдателей вычисляют усредненные количества трех основных цветов (удельные координаты цвета), смесь которых зрительно неотличима от чистого спектрального цвета. Графические зависимости количества основных цветов от длины волны представляют собой так называемые кривые сложения цветов. По этим кривым можно рассчитать доли основных цветов, которые необходимы для получения смеси, зрительно неотличимой от излучения сложного спектрального состава. Для этого цвет сложного излучения представляют в виде суммы чистых спектральных цветов, соответствующих его монохроматическим составляющим (с учетом их интенсивностей). Возможность такого представления основана на одном из законов Грассмана, согласно которому цветовые координаты цвета смеси равны суммам аналогичных координат всех смешиваемых цветов.

Для цветов, входящих в цветовой охват системы R, G, B , функции сложения имеют положительные значения. Однако если цвет выходит за пределы этого охвата, то функции сложения принимают отрицательные значения, что создает неудобства при расчетах.

В настоящее время система RGB МКО в основном выполняет вспомогательную, а иногда контрольную функцию. Тем не менее, именно эта система явилась основой цветовой системы XYZ. X, Y и Z - это виртуальные

первичные цвета, которых не существует в природе. Но поскольку они получены на базе математической обработки экспериментальных данных и поддаются измерению, то имеют реальную основу. По крайней мере, эксперимент всегда можно повторить и получить очень близкий результат. Достоинством их является возможность реализации пространства, которое охватывает все цвета, идентифицируемые человеческим глазом.

Выбор цветовых составляющих XYZ -модели вытекал из задач, поставленных при ее разработке, основной из которых являлось устранение недостатков, присущих RGB цветовой системы МКО. В настоящее время колориметрическая система XYZ принята в качестве рабочей системы. В ней обычно выражают результаты измерений, и на ее базе построен ряд новых более совершенных цветовых систем, в частности Lab.

Основу предложенной системы координат XYZ составляют следующие условия:

- для всех реальных цветов координаты цвета XYZ имеют только положительные значения;
- координата Y определяет яркость цвета;
- координаты цветности белого равноэнергетического излучения находятся в центре тяжести треугольника, лежащего на единичной плоскости (рисунок 4).

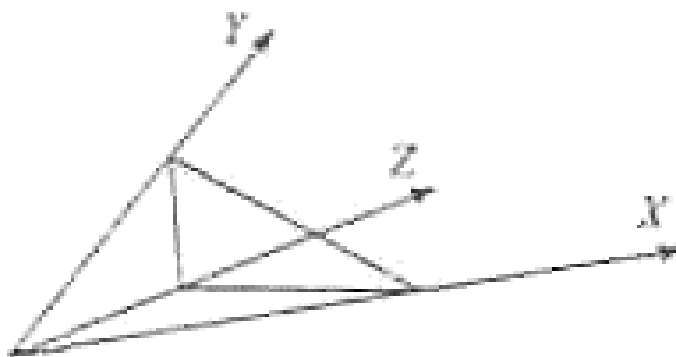


Рисунок 4 - Трехкоординатное цветовое пространство XYZ

Для перехода из системы основных цветов RGB в систему XYZ используют следующие соотношения:

$$X = X_R * R + X_G * G + X_B * B, \quad (5)$$

$$Y = Y_R * R + Y_G * G + Y_B * B, \quad (6)$$

$$Z = Z_R * R + Z_G * G + Z_B * B, \quad (7)$$

где $X_R, X_G, X_B, Y_R, Y_G, Y_B, Z_R, Z_G, Z_B$ – координаты основных цветов в трехкоординатном пространстве RGB. Эти величины стандартизованы.

Координаты цветности в новом цветовом пространстве будут иметь вид:

$$x = \frac{X}{(X+Y+Z)}, \quad y = \frac{Y}{(X+Y+Z)}, \quad z = \frac{Z}{(X+Y+Z)}, \quad (8)$$

где $x + y + z = 1$.

Единица плоскость представляет собой прямоугольный треугольник, называемый графиком цветности, вершинами которого являются точки пересечения с векторами основных цветов. спектральных цветов пересекают единичную плоскость по линии чистых спектральных цветов (рисунок 5), которая ограничивает область существования реальных цветов. Точки S и W соответствуют координатам цветности данного и белого цветов. Цифры – длины волн излучения (λ , нм).

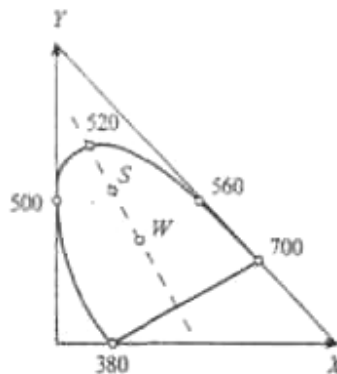


Рисунок 5 - Единичная плоскость в системе XYZ и линия чистых спектральных цветов (сплошная кривая).

Необходимо ориентировать треугольник XYZ таким образом, что равные количества гипотетических основных цветов XYZ давали в сумме белый цвет. В центре треугольника находится опорный белый цвет – точка равных энергий с координатами $x=y=0,33$. Координаты точки опорного белого цвета (фактически это синоним понятия цветовой температуры) зависят от источника освещения. Ниже приведены их значения (таблица 5) для нескольких вариантов освещения, используемых в качестве стандартных источников.

Помимо координат X, Y, Z часто используют такие характеристики, как цветовой тон ($T(\lambda)$) и чистота цвета (P), однозначно определяющие цветность излучения. Очевидно, что любой реальный цвет может быть получен аддитивным смешением белого и соответствующего монохроматического излучений. Цветовой тон определяется точкой пересечения прямой, проходящей через координаты цветности данного и белого цветов (точки S и W на рисунке 3), с линией чистых спектральных цветов (рисунок 6). Чистота цвета показывает, в каких соотношениях смешаны монохроматический и белый цвета; при этом чистота монохроматического излучения равна единице, а белого – нулю. Цифры – длины волн излучения (λ , нм). Однако координаты белого цвета зависят от источника освещения (таблица 5).

Таблица 5 - Зависимость координат белого цвета модели XYZ от типа источника освещения

Источник	Цветовая температура, К	Координаты	
		x	y
Лампа с вольфрамовой нитью накаливания	2856	0,448	0,408
Солнечный свет в полдень	5600	0,349	0,352

Продолжение таблицы 5

Полуденное освещение при сплошной облачности	6300	0,310	0,316
Стандарт для мониторов и NTSC	6400	0,313	0,329

Использование цветового графика в системе XYZ сопряжено с некоторыми трудностями. Отдельные расстояния между двумя точками на диаграмме не соотносятся с визуальным восприятием человека, поскольку шкала диаграммы неравномерна. Кроме того, она не дает информации о светлоте цвета.

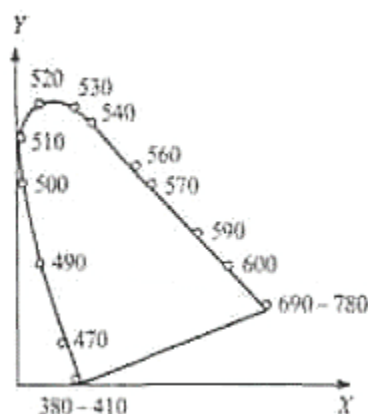


Рисунок 6 - Цветовой график в системе XYZ .

Рассмотренные выше системы позволяют производить количественную оценку цвета, однако визуально оценить с их помощью разницу между двумя цветами нельзя, так как расстояние между точками в цветовом пространстве не соответствует надежно ощущаемому глазом различию. предпринято довольно много попыток создания такого равноконтрастного пространства, в котором расстояние между двумя точками коррелировало бы с визуально принимаемым изменением цвета. Однако пока этого сделать не удалось.

Международной комиссией по освещению предложено несколько таких квазиравноконтрастных систем, самой распространенной из которых

является *CIELAB*. Цветовое пространство *LAB* предлагает абстрактные параметры *X* и *Y* заменить на реальные параметры:

- *A* - цветность в диапазоне от зеленого до красного;
- *B* - цветность в диапазоне от синего до желтого;
- *L* - светлота (Lightness), представляющая собой аналог яркости.

Используемые в *LAB*-модели цветовые координаты созданы на базе ощущений эталонной системы измерения цвета, яркостная (ахроматическая) и цветовая информация должны быть разделены не только количественно, но и качественно. Именно это и реализовано в *LAB*-модели, Применяемый в ней принцип независимого описания цветности и яркости позволяет изменять яркость изображения без искажения цветовых тонов (оттенков) изображения.

Координаты *L*, *A*, *B* в этой системе связаны с координатами *X*, *Y*, *Z* соотношениями

$$L = 116 * \left(\frac{Y}{Y_w}\right)^{\frac{1}{3}} - 16, \quad (9)$$

$$A = 500 * \left(\frac{X}{X_w}\right)^{\frac{1}{3}} - \left(\frac{Y}{Y_w}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad (10)$$

$$B = 200 * \left(\frac{Y}{Y_w}\right)^{\frac{1}{3}} - \left(\frac{Z}{Z_w}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad (11)$$

где *L* — светлота;

A, *B* — координаты цвета (*A* — красно-зеленая ось, *B* — желто-синяя ось);

X_w, *Y_w*, *Z_w* — координаты белого цвета в системе *XYZ*, оси *A* и *B* располагаются в плоскости, перпендикулярной оси *L* (рисунок 7).

Расстояние между двумя точками в трехкоординатном цветовом пространстве *LAB* характеризует полное цветовое различие (ΔE), которое вычисляют по формуле

$$\Delta E = \sqrt{(\Delta L)^2 + (\Delta A)^2 + (\Delta B)^2} \quad (12)$$

Цветовой тон (T) и насыщенность цвета (S) следующими соотношениями:

$$S^2 = A^2 + B^2, \quad (13)$$

$$T = \arctg\left(\frac{B}{A}\right) \quad (14)$$

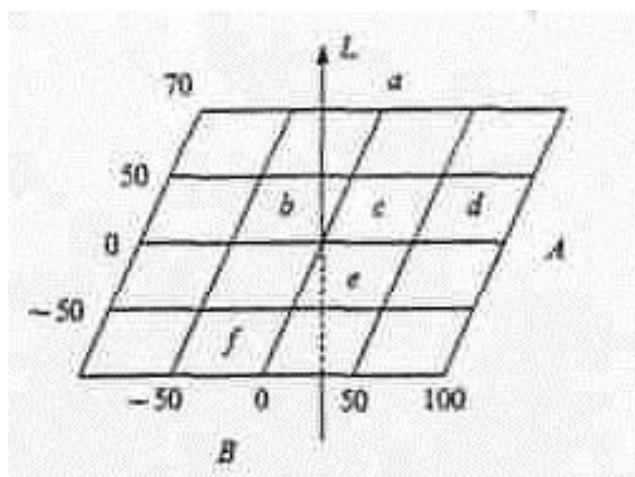


Рисунок 7 - Трехкоординатное цветовое пространство LAB . Области белого (a), зеленого (b), серого (c), желтого (d), пурпурного (e) и синего (f) цветов.

Для выражения желтизны (G) и белизны (W) используют уравнения:

$$G = \frac{100 \cdot 1.28 \cdot X - 1.06 \cdot Z}{Y}, \quad (15)$$

$$W = 100 - \Delta E \quad (16)$$

Цветовое пространство $CIELAB$ наиболее приемлемо для расчетов, так как равные расстояния между точками, соответствующими разным цветам, в любых частях этой системы координат соотносятся со зрительным восприятием, что позволяет ввести удобную меру для количественного определения цветовых различий.

1.4.4. Расчет координат цвета и цветности

Существуют два основных способа измерения цвета, различающихся по методике расчета: по спектральному составу излучения или по числу отдельных цветов в смеси, дающий определяемый цвет. Согласно этой классификации, все цветоизмерительные приборы и методики расчета координат цвета можно условно разделить в зависимости от измеряемой величины на два типа.

1. Координаты цвета рассчитывают по известному спектральному составу излучения анализируемого соединения (спектры поглощения, отражения и т.д.). Этот метод считается наиболее точным.

2. На основании измеренной общей функции сложения цветов (нередко соответствующей чувствительности фотоэлементов) сразу получают координаты цвета определяемого компонента. Развитие метода сдерживается из-за трудности в изготовлении фотоэлементов с требуемой спектральной чувствительностью.

1.4.5. Цифровой анализ цвета

Аналитический сигнал от аналита может быть измерен не только стандартным спектрофотометрическим оборудованием, но современными решениями в области методов обнаружения, например, портативным спектрометром, компьютером или смартфоном, а также визуальным тест-методом без использования специального оборудования. Очевидно, что визуальные тест-методы не могут быть такими же точными как спектрофотометрия. Визуальные изменения цвета должны быть измерены определенными устройствами (цифровой сканер, цифровая камера, смартфон и т.д.). Изображение сенсора фотографируется и загружается в компьютер, цвет интерпретируется цифровым анализом цвета. В настоящее время,

развитие цифровой обработки изображений широко применяется в аналитической химии ввиду возможности быстрого и непосредственного количественного определения [13] и одновременной качественной индикации аналита (рисунок 8).

Аналитический сигнал полимерного сенсора может быть исследован электронной вычислительной системой.

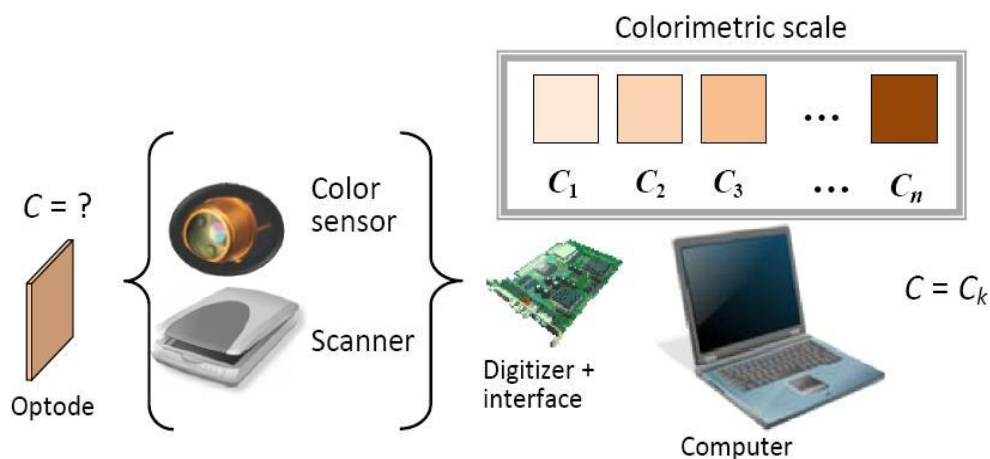


Рисунок 8 - Структура цифрового анализа цвета

Цифровой анализ цвета – это мощный и гибкий инструмент с возможностью применения во многих областях, таких как материаловедение, биология, медицина, и дистанционный сбор данных. Когда изображение оцифровано, его можно усовершенствовать, используя различные цветофильтры. Такое изображение может быть проанализировано на обнаружение таких параметров как площадь, форма, цвет, интенсивность и т.д. Коммерческое программное обеспечение доступно на персональных компьютерах и используется с высокой эффективностью. Во многих случаях количественная оценка, требующая часов или дней с использованием механизированных методов, может быть выполнена в течение нескольких минут с использованием компьютерных технологий, что позволяет пользователю использовать большие наборы данных и получать статистически обоснованные результаты [14]. Когда изображения оцифровываются, цвет преобразуется в числа, которые хранятся в памяти компьютера. Изображение отбирается при конечном числе позиций, так

называемых пикселей, каждый из которых имеет свою интенсивность и свои цветовые координаты.

В последние десятилетия несколько стандартных колориметрических реакций химического анализа миниатюризированы до микроканалов и микропластинок, включая методы, применимые для мониторинга окружающей среды. Преимуществами метода являются миниатюризация, включая сокращение требуемых реагентов, повышение безопасности, сокращение отходов. Однако широкое использование микромасштабных методов ограничивается высокой стоимостью приборов для индикации и интерпретации результатов. Хотя спектрофотометры сканируют пики определенных длин волн, спектры поглощения взаимосвязаны с пиками соседних спектров, что подразумевает, что данные широкополосной интенсивности красных, зеленых и синих каналов действительно могут быть применимы для цифровой колориметрической квантификации.

1.5. Использование новых технологий цветометрического анализа

В [17-21] авторы демонстрируют, что цифровой анализ сканированного изображения пластинки-аналита может заменить спектрофотометр для небольшого спектра задач. Данное открытие позволяет проводить экономичную и микромасштабную количественную оценку нескольких соединений непосредственно в лаборатории. Кроме того, популярные методы исследования и изучения свойств окружающей среды, такие как мониторинг качества воды, теперь могут быть проведены недорого и достаточно точно, используя цифровой анализ изображений.

Авторами [22] изучен новый подход к использованию настольного сканера и программного обеспечения для цифровой обработки изображений для количественной оценки интенсивности цвета веществ, адсорбированных на пенополиуретане. Суть метода состоит в сканировании цветных образцов пенополиуретана с помощью настольного сканера, обработки изображений с

использованием графического редактора и построении калибровочных графиков яркости выбранного канала (R, G или B) в качестве функции от концентрации испытуемого соединения. Преимуществами метода являются его высокая производительность, экспрессность и возможность обработки результатов простыми численными методами. В работе доказано, что вещества, адсорбированные на пенополиуретане, могут быть определены с использованием сканера и соответствующего программного обеспечения для обработки изображений с такой же точностью и чувствительностью, что и при использовании спектроскопии диффузного отражения.

Использование офисных сканеров, цифровых камер и последующей обработкой данных в разных цветовых координатах (RGB, CMYK, LAB и HSV) показано в [23]. Объектом исследования являлся полимерный азокраситель, который был получен реакцией между диазотизованным пенополиуретаном и 3-гидрокси-7,8-бензо-1,2,3,4-тетрагидрохинолином. В работе сравнивалось представление цвета в различных цветовых системах, и на основе этого выявлены наиболее важные с аналитической точки зрения цветовые координаты, в которых значения каналов при исследовании азокрасителей достигают максимального уровня. Авторы продемонстрировали, что калибровочные кривые зависимости численной интерпретации света от концентрации нитрита в водном растворе могут быть аппроксимированы линейной функцией. Пределы обнаружения нитрита (1-3 нг / мл) достигнуты в колориметрических системах RGB и CMYK.

Повсеместное распространение и проникновение смартфонов во все сферы жизнедеятельности меняет концепцию мобильных медицинских услуг и обещает изменить область применения сенсора. Смартфоноориентированные сенсоры изучены с использованием различных подходов, либо с использованием периферии смартфона в качестве чувствительного или воспринимающего сигнал элемента, либо с помощью инструментального интерфейса. Биосенсоры на основе смартфонов обладают большим потенциалом в здравоохранении, как инструмент для улучшения

качества жизни, безопасности пищевых продуктов, мониторинга окружающей среды и биозащиты, особенно в отдаленных и сельских районах.

Для использования смартфона в качестве детектора необходима взаимодействие смартфоны с каким-либо устройством, которое содержит необходимые компоненты инструмента в упрощенном фиде. Камера для смартфонов используется для детекции выходного сигнала. Интересный пример был разработан Брайслером и др. [24], группа исследователей разработала микроскоп, прикрепленный к смартфону для светлорольной микроскопии и отображения эффекта флуоресценции. Система включает в себя различные элементы, встроенные в компактное устройство. В частности, для флуоресцентной визуализации система включает в себя стандартный окуляр микроскопа, эмиссионный фильтр, объектив, конденсорную линзу, экситационный фильтр, проекционную линзу и светоизлучающий диод (LED) в качестве источника возбуждения (рисунок 9). При извлечении фильтров и светодиодов, аппарат становится микроскопом. Авторы продемонстрировали применимость этого устройства для клинической диагностики путем получения изображений высокого разрешения для образцов крови, инфицированной тропической малярией и диагностирование туберкулеза при помощи флуоресцентных изображений мазков инфицированной ауряминами *M.-tuberculosis*. Данные анализы проводятся в настоящее время с использованием стандартный микроскопов.



(b)

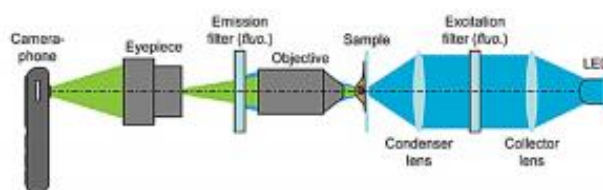


Рисунок 9 - Цифровой микроскоп и флуориметр

Тем не менее, авторы продемонстрировали возможность проведения микроскопических исследований образцов крови с использованием обычной камеры для смартфонов. Это связано с тем, что высокое разрешение камеры является достаточным для визуализации морфологии клеток крови и микроорганизмов. Эта концепция может быть использована для преодоления проблемы низкого уровня медицины в развивающихся и сельских районах.

В [25] разработана и реализована оптическая платформа на основе смартфона для колориметрического анализа гематокрита крови с использованием одноразового микрофлюидного устройства. Используя встроенную камеру в смартфоне, изображения человеческой крови в микроканале проанализированы мобильным приложением. Чтобы избежать засвечивания изображения и нивелировать воздействие окружающего света, в эту платформу включена уникальная светодиодная модель внутри белого акрилового контейнера (рисунок 10). С помощью мобильного приложения для обработки изображений разработанное устройство успешно

применено для определения различных уровней гематокрита крови человека (с 10% до 65%). Кроме того, исследование результатов при различной глубине микрофлюидного канала показало, что наибольшая чувствительность определения гематокрита достигалась при меньшей глубине микроканала.

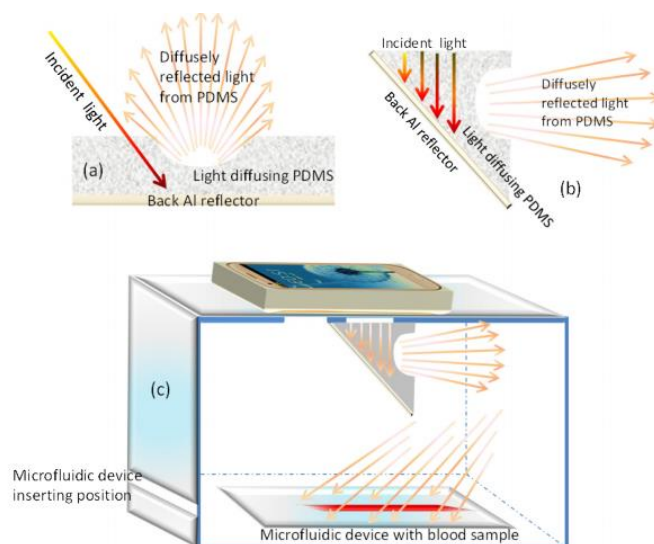


Рисунок 10 – Камера для цветометрических измерений

Тсенг и др., разработали безлинзовый цифровой микроскоп на базе смартфона, который не использует линзы, лазерные или другие оптические компоненты, что значительно упрощает архитектуру системы [26]. Авторы использовали светодиод для вертикального освещения образца. При взаимодействии с образцом, свет от диода рассеивается и преломляется. Световые волны, проходящие через исследуемые объекты (например, клетки), которые создают помехи нерассеянному свету, тем самым создавая голограмму каждого объекта, которая воспринимается с помощью камеры смартфона. Авторы продемонстрировали эффективность системы путем визуализации микрочастиц различных размеров, красных и белых клеток крови, тромбоцитов и паразитов.

Этот бесконтактный микроскоп для смартфонов имеет несколько важных особенностей, включая компактность, легкость (38 г) и экономическую эффективность, что делает его применимым для децентрализованного использования по назначению, особенно в

развивающихся областях, которые обделены высокими технологиями. С другой стороны, пространственное разрешение изображений ограничено размером пикселя на датчике, что делает систему менее точной, чем стандартный микроскоп. Кроме того, для получения реальных изображений требуется алгоритм для голографического моделирования, который не может быть реализован в смартфоне, т.к. требует существенных вычислительных мощностей и снизит скорость работы смартфона. Это означает, что построение голографической модели должен выполняться удаленно, например, в центральной больнице. Использование планшета с большим экраном также может быть очень полезным, особенно если изображение объекта необходимо для диагностики. Для обыденного использования вполне достаточен простой мобильный телефон, даже если он имеет небольшой экран.

Разработка автономных сенсоров на базе смартфонов позволяет полностью использовать преимущества смартфона. В настоящее время смартфоны рассматриваются как реальные аналитические приборы и станции обработки данных, если они могут использоваться для выполнения всего аналитического процесса, от анализа до сбора данных и их обработки. В таких случаях смартфон не является вспомогательным звеном, а даже формирует «скелет» аналитической платформы. В нескольких работах измерительные системы, в которых для разработки датчиков на базе смартфонов использовались различные принципы обнаружения, не нуждаются в дополнительных устройствах.

Цветочувствительность привлекла много внимания из-за ее низкой стоимости, простоты и практичности. Результаты ее применения визуальны и стабильны, а сам метод недорог и прост в исполнении. Камеры смартфонов используют недорогие CMOS-матрицы, которые реагируют на красный, зеленый и синий (RGB) свет. Эти камеры объединяют ряд функций, таких как автоматический баланс белого (AWB), который предназначен для обеспечения хорошей цветопередачи путем настройки обнаруженных

сигналов RGB с различными коэффициентами. Для редактирования фотографий, цветового анализа RGB-каналов и обработки изображений разрабатывается все больше мобильных приложений. Эти приложения позволяют анализировать цифровые изображения и собирать количественные данные, измеряя изменения цвета и интенсивности. Теоретически эти датчики имеют относительно низкую чувствительность и поэтому применимы для анализов, присутствующих в относительно высоких концентрациях в биологических жидкостях, образцах окружающей среды и пищевых продуктах. Хотя смартфоны имеют интегрированные функции цветового баланса, камера смартфона оптимизирована для съемки в условиях высокой освещенности, и трудно контролировать условия освещения во время визуализации из-за этого трудно выполнять точные количественные измерения. Это справедливо вне контролируемых сред, т.е. не в лабораториях. Кроме того, анализ изображений не всегда прост, особенно при небольших изменениях цвета. В этих случаях не всегда возможно использовать цветовое пространство RGB. Вместо этого следует использовать альтернативу, такую как HSV или CIE. По всем этим причинам при разработке колориметрических систем для интеграции со смартфонами часто требуются внешняя периферия. Их цель - устранение изменений условий освещения и стационарное позиционирование камеры. Специальное программное обеспечение и дополнительные компоненты, такие как батареи, светодиодные матрицы (для отражения и передачи) и объективы, могут устранять эти ограничения и позволят проводить измерения с более высокой точностью.

Исследовательская группа Озкана [27] представила устройство на основе смартфона для количественного определения ионов ртути (II) в воде с использованием плазмидных наночастиц золота (ПНЗ) и анализа колориметрической передачи аптамера (синтетический полинуклеотид). Аптамеры, богатые тиминами (5'-TTTTTTTTTTT-3'), имеют сильное сродство к ПНЗ и образуют защитный слой на поверхности наночастиц, что

предотвращает их агрегацию. В присутствии ионов ртути (II) аптамеры образуют более стабильный комплекс $T-Hg_2^+-T$. Таким образом, изменение отношения между проходящим светом на двух длинах волн (523 нм, зеленый и 625 нм, красный) связано с агрегацией ПНЗ. Данный метод используется для количественного определения концентрации ионов ртути (ПО ~ 3,5 млрд¹) с использованием двухцветного метода контроля. Требуемое оборудование: два светодиода на батарейках, излучающие свет на частоте 523 нм (зеленый) и 625 нм (красный), чтобы следить за сдвигом в низкоамплитудных длинах волн, диспергированных и агрегированных ПНЗ соответственно; светоотражатель; камера для образцов и контрольных кювет; внешний объектив для сближения прошедшего света и фокусировки двух цветных изображений. Специальное приложение на платформе Android разработано для захвата изображений, их цифрового анализа и последующей обработке. ПО этой двухцветной платформы на базе смартфонов более чем в шесть раз превосходит ПО того же самого анализа, который измеряется переносным ультрафиолетовым спектрометром (Ocean Optics, HR2000 +) (ПО~ 24,6млрд¹).

Эта же группа исследователей разработала методику обнаружения и количественного определения аллергена в продуктах питания на основе коэффициента пропускания (длина волны 650 нм), метод интегрирован в платформу для проведения анализов на смартфоне (называемую iTube) (рисунок 11) [28]. Иммуноколориметрический анализ основан на инструментах определения пищевой аллергии на арахис (набор для тестирования Veratox, Neogen). Полученные результаты сопоставимы со стандартным тест-набором ЭЛИСА, анализы проводятся в лаборатории, рабочий диапазон: 1-25 м.д., время анализа: 30 мин. Платформа iTube состоит из опто-механического крепления к камере мобильного телефона, а также тест-набора и контрольной трубки. Трубка содержит недорогую пластиковую плоско-выпуклую линзу, два световых диода (светодиоды), длины волн которых специально выбраны в соответствии со

спектром поглощения цветовой обработки сигнала, проводимого в трубке; двумя рассеивателями света и круговыми отверстиями. Испытательные и контрольные трубки с образцами активируются аллергенспецифическими агентами и запечатываются крышками. Затем трубки вставляют в крепление, где интенсивность рассеивания для каждой трубки воспринимается с помощью камеры мобильного телефона. Эти цифровые изображения труб обрабатываются в течение одной секунды. Специально разработанное приложение, установленное на мобильном телефоне, определяет количество аллергена, присутствующего в образце.

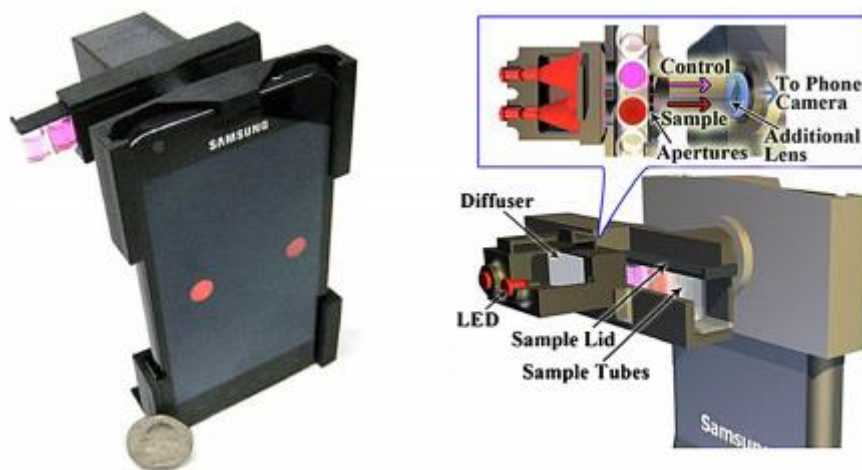


Рисунок 11 – Иммуноколориметр iTube

Вашист и др. разработали очень простой колориметрический датчик на основе смартфона для обнаружения содержания иммуноферментного С-реакционно-способного белка (CRP), выполненного в обычном формате микротитровальной пластины [29]. Они сообщили, что исполнение датчика аналогично обычным трехслойным тест-наборам ELISA и клинически аккредитованным аналитическим анализаторам. Во всех случаях, несмотря на то, что аналитические характеристики согласуются с результатами, полученными с использованием обычных лабораторных методов, устройства будут иметь разные ограничения, когда речь заходит о фактическом применении приложения. Использование таких датчиков

неквалифицированным персоналом нецелесообразно ввиду сложности в варьировании различных параметров устройства (которые часто требуют изменения свойств смартфона), необходимости использования лабораторных инструментов (таких как пипетки), т.к. реакции выполняются в растворе, сложности хранения реагентов и времени инкубации.

Другие устройства используют светоотражение для измерения крайней точки ферментативной реакции. Ферменты для конкретного типа исследования, иммобилизуют на тест-полосках. Интенсивность отраженного света пигментобразующей подложки непосредственно связана с количеством анализируемого вещества в биологических жидкостях. Например, группа Эриксона разработала и охарактеризовала систему smartCARD (приложение для экспресс-диагностики холестерина) [30] (рисунок 12).



Рисунок 12 – Система smartCARD для экспресс-диагностики холестерина

Устройство использует сухие тест-полоски, изготовленные CardioChek (Polymer Technology Systems Inc., IN, США). Тест-полоска снабжена набором фильтровальных бумаг, которые отделяют плазму от красных кровяных клеток и направляют ее часть плазмы на специальную реакционную

площадку для анализа. В этот момент фермент холестерин-оксидазы превращает общий холестерин и холестерин ЛПВП в холест-4-ен-3-он и пероксид водорода. Перекись затем реагирует с дизамещенным анилином с образованием хинон-иминовых красителей, которые играют главную роль в изменении цвета.

Специальное устройство для смартфона обеспечивает сплошное и воспроизводимое отображение красителя на тест-полоске, вспышка камеры освещает полоску, а черный полидиметилсилоксановый диспергатор обеспечивает равномерное освещение. Приложение, разработанное на платформе iOS, анализирует такие параметры, как оттенок, насыщенность и яркость исследуемой области, количественно оценивает уровень холестерина и отображает значение на экране. Результаты тестирования могут быть получены с использованием встроенной камеры смартфона и колориметрического анализа. Устройство может точно определить физиологические уровни общего холестерина в крови (100-400 мг / дл) в течение 60 секунд путем визуализации стандартных тест-полосок. Оно показывает сходные аналитические характеристики с результатами платного анализатора CardioCheck plus (от Polymer Technology Systems, Inc.). Более того, по сравнению с этим переносным устройством, стандартный коммерческий колориметрический набор (набор для определения уровня холестерина от EnzyChrom™ AF из системы BioAssay) имеет более длительное время анализа (30 мин) и, из-за более низкого рабочего диапазона (0-100 мг / дл) требует, чтобы образец предварительно обрабатывали и разбавляли для количественного определения холестерина в сыворотке крови.

Группа Эриксона также разработала смартфоноориентированные тест-полоски на основе отражения света для отслеживания изменений pH в поту и слюне [31]. Эта система включает корпус смартфона, приложение и одноразовые тест-полоски. Значение pH определяется путем проверки взаимосвязи значения оттенка аналита (пространство HSV) со значениями

pH, хранящейся в памяти приложения. Сообщалось о различных исполнениях тест-платформ с использованием смартфонов для проведения иммунохроматографических исследований [32-38]. В исследованиях могут использоваться различные типы тест-полосок для иммобилизации в специальное устройство, прикрепленное к смартфону. Затем камера смартфона захватывает изображение, которое анализируется и обрабатывается специальным приложением. Группа Эриксона разработала систему для проведения иммунохроматографических исследований, основанную на мобильных технологиях [39]. Система (vitaAID) может быстро количественно оценивать уровни витамина D, оценивая образцы сыворотки крови с помощью тест-полоски. Эта тест-полоска позволяет определять количество 25-гидроксивитамина D по изменению цвета полоски, за основу взят метод иммуноанализа с использованием золота и наночастиц. Система vitaAID может измерять физиологические уровни 25-гидроксивитамина D (рабочий диапазон: 15-110 нМ) в течение примерно 6 часов. Такое длительное время анализа обусловлено критической стадией инкубации ПНЗ-анти25-(ОН)-D на тест-полоске. Полученные результаты сопоставимы с полученными результатами коммерческого набора ELISA (от ALPCO, США). Хотя коммерческий комплект имеет более широкий рабочий диапазон (12-240 нМ), но для получения результатов требуется больше времени (приблизительно 22 часа инкубации при 8-10 ° C). Эти системы имеют несколько преимуществ применительно к здравоохранению:

- Они удобны в использовании, недороги (бумага дешевая и легкодоступная), система полностью автономная, переносная и не требует большого объема анализа (несколько микролитров сыворотки крови);
- Результаты могут быть легко интерпретированы специалистами со средней квалификацией;
- Благодаря широкому спектру реагентов, уже разработанных и протестированных для цветометрических анализов, можно применить данную методику к определению множества аналитов;

- Варьирование толщины фильтровальной бумаги может быть использовано для калибровки чувствительности метода к различным диапазонам концентрации аналита.

Однако есть и ограничения. Из-за изменения цвета трудно получить количественную информацию. Это связано с изменчивостью количества, интенсивности и яркости света, отраженного от поверхности, на которой проводился анализ, и очень низкой однородности цвета на участке обнаружения. Для измерения требуются высокие (например, миллимолярные) концентрации аналитов, метод непригоден к определению следовых количеств аналита. Но такие низкие (пикомолярные микромолярные) концентрации аналитов содержатся в биологических жидкостях, определение таких низких концентраций представляют наибольший интерес для клинических исследований.

Фотолюминесценция - еще один подход к созданию чувствительных сенсоров на основе смартфонов. Основная проблема заключается в сложности требуемого инструментария, который включает в себя оптический модуль, содержащий источник света, оптический фильтр и объектив. Измерительное звено также должно отвечать определенным геометрическим и оптическим требованиям. Несмотря на эти ограничения, флуоресценция, благодаря своей высокой чувствительности, широко используется в качестве метода обнаружения в сенсорах. В.К. Раджендан объединил технологию иммунохроматографического анализа с технологиями анализа флуоресценции с помощью мобильных технологий [40]. Наночастицы кремнезема, добавленные в флуоресцеин изотиоционат и сопряженные с соответствующими антителами, использовали в обычном иммунохроматографическом анализе для обнаружения бактериальных патогенов пищевого происхождения, *Salmonella* и *Escherichia coli* O157. Флуоресценцию регистрировали путем вставки нитроцеллюлозной полоски в флуориметр на основе смартфона, состоящий из легкого оптического модуля, содержащего светодиодный источник света, набор флуоресцентных

фильтров и объектив, прикрепленный к встроенной камере, в которой производится захват флуоресцентных изображений высокого разрешения. Изображения анализируются с помощью приложения с быстрой обработкой, позволяющей обнаруживать аналит всего за несколько минут. mГруппа ученых под руководством А. Озкана разработала другое портативное устройство на основе смартфона для флуоресцентного обнаружения альбумина в образцах мочи [41].

Существует всего несколько примеров электрохемилюминесценции (ECL) в сочетании с техникой обнаружения на основе смартфонов, несмотря на широкое распространение этого метода в обычных биосенсорах и в общедоступных клинических иммунохимических и генно-зондовых автоматических анализаторах. Прототип представлен группой Д.Л. Дэлани [42], которые разработали аналитическое устройство на основе микрофлюидной бумаги (или μ -PAD) с использованием смартфона в качестве ECL-детектора. Используя бумагу для струйной печати, жидкие подложки и электроды с экранированной печатью, они создали очень недорогие одноразовые датчики ECL, которые можно считывать с помощью смартфона.

Группа Дозвена разработала недорогую систему для генерации, контроля и обнаружения ECL с помощью смартфона [43]. Простая интегральная схема обнаружения тона использовалась для переключения питания с порта USB на «On-The-Go» (OTG) порт телефона с использованием звуковых тонов, воспроизводимых через аудиоразъем устройства. Затем для измерения испускаемого света использовалась камера смартфона. Авторы сравнивали характеристики электрохимического звена, контролируемого смартфоном, с результатами, полученными с использованием обычного потенциометра. Затем они использовали этот подход для изучения свойств ECL водорастворимого комплекса иридия (III), который испускает синюю область спектра.

2. Объект и методы исследования

2.1. Оптическая полимерная матрица

ПМММ получена в виде прозрачной пластины толщиной $(0,60 \pm 0,04)$ мм. Из исходной пластины вырезали пластины размером $6,0 \times 8,0$ мм массой около 0,03 г. Для твердофазной экстракции рекомендуется данный размер пластины, поскольку при увеличении объема ПММ снижается удельная доля экстрагированного вещества, что ухудшает результат определения.

2.2. Оборудование и методы исследования

Спектры поглощения ПММ регистрировали на спектрофотометре Shimadzu UV-mini-1240 (Shimadzu Corporation, Japan) и портативном спектрофотометре Datacolor CHECK II plus (Datacolor Corporation, Китай). Спектрофотометр Datacolor CHECK II plus регистрирует цветовые координаты ПММ в цветовой системе XYZ.

Колориметрические параметры образцов получены из изображений ПММ с помощью смартфона (Galaxy A3, 13 MP, Samsung Electronics Co, Корея). Мобильное приложение для обработки изображений разработано на платформе Android Studio для ОС Android (рисунок 12). Система смартфон-ПММ является набором инструментов для определения концентраций аналитов в среде ПММ. Приложение предназначено для захвата изображения ПМММ с последующей обработке информации, ее сравнения с эталонным, хранящимся в памяти телефона.

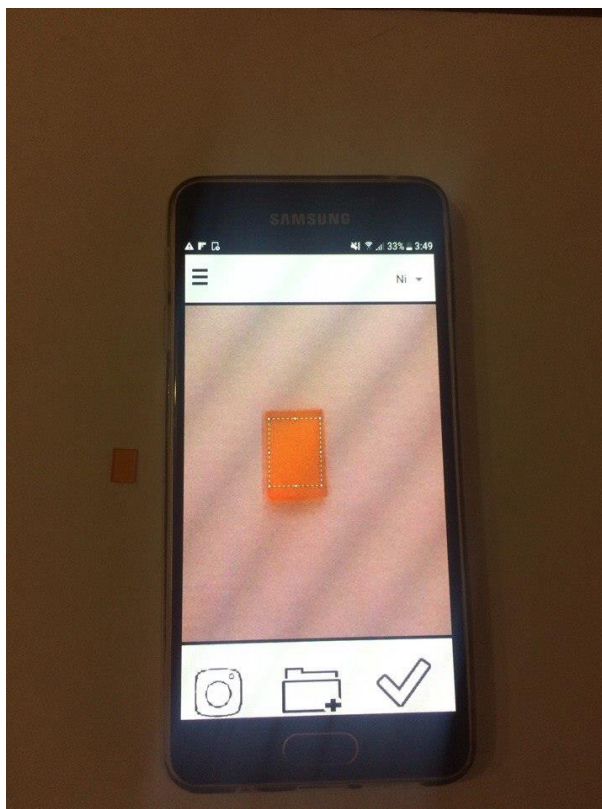


Рисунок 12 – Мобильное приложение для колориметрии

В цифровом цветометрическом анализе для определения концентрации веществ используется представление цвета исследуемого образца в виде координат цвета в одной из стандартных цветовых координатных систем, например, RGB, XYZ или CIELab [12]. Варианты этого метода основываются на получении аналитического сигнала от оптических химических сенсоров, которые сорбируют определяемый компонент из исследуемой среды, изменяя при этом свой цвет. Это изменение цвета указывает на присутствие определяемого компонента, а интенсивность окраски сенсора зависит от его количества. Цвет оптических сенсоров преобразуется в числовые значения цветовых координат, которые и трактуются как аналитическая информация. Наиболее предпочтительной является модель RGB, поскольку RGB-представление обеспечивает линейный характер калибровочной зависимости.

Концентрация аналита зависит от цветовых координат ПММ:

$$c = f(R, G, B) \quad (21)$$

Тогда общий вид уравнения регрессии:

$$c = a_0 + a_r R + a_b B + a_g G + a_{rr} R^2 + a_{bb} B^2 + a_{gg} G^2 + a_{rb} RB + \\ + a_{rg} RG + a_{bg} BG + \varphi(\varepsilon). \quad (22)$$

где a_i - калибровочные коэффициенты; R, G, B – цветовые координаты в RGB-системе представления цвета; $\varphi(\varepsilon)$ – погрешность уравнения регрессии.

Задача устранения засвечивания изображения и выравнивания яркости естественного освещения являются главными проблемами цветовой коррекции. Зарубежные авторы для устранения этого негативного фактора разработали соответствующие аппараты, главное назначение которых стандартизировать условия съемки. Однако, для решения этой задачи решено ввести поправочные коэффициенты, тогда уравнение регрессии в общем виде:

$$c = a_0 + k_r a_r R + k_b a_b B + k_g a_g G + a_{rr} R^2 + a_{bb} B^2 + a_{gg} G^2 + \\ + a_{rb} RB + a_{rg} RG + a_{bg} GB \quad (23)$$

где k_r, k_b, k_g – поправочные коэффициенты.

Регрессионная зависимость, соответствующая определенной концентрации аналита установлена с помощью разработанного приложения на языке программирования C# (Си шарп) и пакета программного обеспечения Mathcad. Приложение позволяет определить средние значения каждого из цветовых каналов, путем сканирования каждого пикселя выделенной области изображения. Окно приложения представлено на рисунке 14.

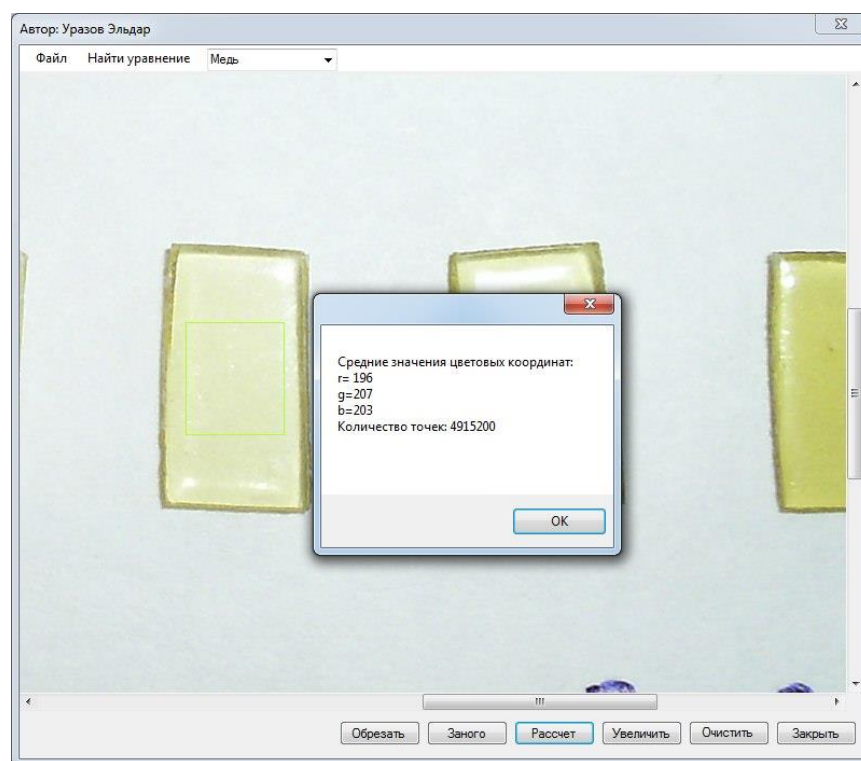


Рисунок 14 – Окно разработанного программного комплекса
установления цветовых координат

В приложении реализован алгоритм для исключения из расчета дефектных точек выделенной области. Пиксель, каждая из координат которого существенно отличается от средних, исключается из расчета. И расчет производится до исключения всех «битых» пикселей из выборки. Для корректного расчета необходимо выбрать такую область, в которой наблюдается сплошность и отсутствие каких-либо шумов, таких как тени, сияния и т. д.

Калибровочные коэффициенты a_i находили с помощью методов математической статистики, а именно шаговой регрессии. Цель шаговой регрессии состоит в отборе из большого количества предикатов небольшой подгруппы переменных, которые вносят наибольший вклад в вариацию зависимой переменной. Следует отметить, что регрессионная модель непременно должна содержать G и B канал для расчета корректирующих коэффициентов.

Изыскание регрессионных уравнений производился в программном комплексе Mathcad. Исходными данными для установления математической зависимости между концентрацией аналита и цветом ПММ являлись матрицы данных в виде:

$$R = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ r_4 \\ \dots \\ r_n \end{pmatrix}; G = \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ g_3 \\ g_4 \\ \dots \\ g_n \end{pmatrix}; B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ \dots \\ b_n \end{pmatrix}; C = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ \dots \\ c_n \end{pmatrix} \quad (29)$$

где r_i, g_i, b_i – значение цветового канала, соответствующего концентрации c_i .

Для получения достоверных данных для каждой i -ой концентрации сняты не менее 5 значений цветовых координат различных ПМММ.

Для оценки влияния концентрации на значение цветовых координат строили корреляционную матрицу (рис.14). Корреляционная матрица — это квадратная (или прямоугольная) таблица, в которой на пересечении соответствующих строки и столбца находятся коэффициенты корреляции между соответствующими параметрами.

$$r = \begin{matrix} & \begin{matrix} R & G & B & C \end{matrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0.864 & -0.48 & -0.601 \\ 0.864 & 1 & -0.812 & -0.888 \\ -0.48 & -0.812 & 1 & 0.988 \\ -0.601 & -0.888 & 0.988 & 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

Рисунок 14 – общий вид корреляционной матрицы

Фактор, имеющий наибольшее значение включается в уравнение первым. Далее, факторы поочередно вводятся в уравнение так называемым "прямым методом". При проверке значимости введенного фактора

определяется, насколько уменьшается сумма квадратов остатков и увеличивается величина множественного коэффициента корреляции. Одновременно используется и обратный метод, т.е. исключение факторов, ставших незначимыми на основе t-критерия Стьюдента. Фактор является незначимым, если его включение в уравнение регрессии только изменяет значение коэффициентов регрессии, не уменьшая значительно суммы квадратов остатков и не увеличивая их значения. Если при включении в модель соответствующего факторного признака величина множественного коэффициента корреляции увеличивается, а коэффициент регрессии не изменяется (или меняется незначительно), то данный признак существен и его включение в уравнение регрессии необходимо.

Остановка алгоритма осуществляется при достижении заданного минимума критерия Маллоуза. Данный критерий предназначен для оценки ошибки прогнозирования и среднеквадратичной ошибки математической модели.

Доля объясненной дисперсии модели оценивали коэффициент детерминации, согласно формуле

$$R := \frac{\sum_{i=0}^{n-1} (y_i - \text{mean}(c))^2}{\sum_{i=0}^{n-1} (c_i - \text{mean}(c))^2} \quad (30)$$

где y_i и c_i – расчетное и фактическое значение объясняемой переменной;
 $\text{mean}(c)$ – среднее значение.

Относительная погрешность уравнения регрессии вычисляется как

$$\theta = \frac{\sigma}{\bar{c}} \quad (31)$$

где σ – стандартная ошибка дисперсии;

\bar{c} – среднее значение.

3. Цветометрическое исследование полимерных оптодов

Метод наименьших квадратов для построения регрессионной кривой и оценка погрешностей реализовывали в программе Mathcad согласно формулам (23-30). Уравнение регрессии, характеризующую зависимость концентрации никеля от цветовых координат ПММ:

$$C = 1.972 - 8.249 * 10^{-3} * G - 8.28 * 10^{-3} * B \quad (31)$$

В уравнении отсутствует регрессор R, поскольку для каждой концентрации значение R-канала равнялось 255. Данный цветовой канал является инвариантным по отношению концентрации никеля в растворе, и для дальнейших расчетов его можно исключить. Данное уравнение является базовым, хранящимся в памяти мобильного приложения, для определения концентрации ионов никеля. Оценки погрешностей приведены в таблице 6 для ПММ с иммобилизованными ионами Ni^{2+} .

Таблица 6 - Оценка величины погрешности уравнения регрессии

Теор, мг/л	Эксп. мг/л	Относительная погрешность, %	Погрешность уравнения регрессии, %	R ²
0	0,03	0,75	9,7	0,987
0,05	0,054	8,00		
0,1	0,11	10,00		
0,3	0,286	4,67		
0,5	0,532	6,40		
1	1,073	7,30		

Для меди уравнение регрессии имеет следующий вид:

$$C = -3,938 + 0,039 * R - 7,911 * 10^{-3} * G - 0.014 * B \quad (31)$$

Из экспериментальных данных видно, что цветовые координаты ПММ коррелированы с изменением концентрации. Ввиду этого для описания зависимости концентрации аналита от цветовых координат ПММ необходимо присутствие всех цветовых каналов. Это связано с природой коричневого цвета, в тоне которого и происходит вариация.

С изменением тона коричневого цвета претерпевает изменения весь трехкомпонентный спектр цветовой системы RGB, это подчеркивает необходимость применения данной системы в колориметрических интерпретациях аналитических сигналов, т.к. система оперирует линейной комбинацией цветовых каналов. Для Cu^{2+} оценка погрешности приведена в таблице 8.

Таблица 8 – Оценка величины погрешности уравнения регрессии

Теор, мг/л	Эксп. мг/л	Относительная погрешность, %	Погрешность уравнения регрессии, %	R ²
0,1	0,096	4	5,7	0,99
0,3	0,33	1		
0,5	0,454	1,2		
0,7	0,73	5,7		
1	0,989	1,1		

Из экспериментальных данных видно, что выбранный метод колориметрического анализа вполне пригоден как замена спектрофотометрическому. Погрешность метода составила 9,7% и 5,7%. Для успешной серии фотографий необходимо нивелировать воздействие окружающего света. Дистанция между образцом и камерой фотоаппарата должна быть постоянной для фотографирования каждого из образцов. Данная проблема может быть решена путем введения поправочных коэффициентов и поправки на так называемую «точку наблюдения».

Для определения поправочных коэффициентов, перед экспериментом необходимо сделать фотографию эталонного образца с определенной концентрацией. Поправочные коэффициенты рассчитывали по следующим уравнениям:

$$k_r = \frac{R_n}{R_0} \quad (24)$$

$$k_b = \frac{B_n}{B_0}. \quad (25)$$

$$k_g = \frac{G_n}{G_0}. \quad (26)$$

где R_0, B_0, G_0 , - цветовые координаты определенного образца в начальных условиях;

R_n, B_n, G_n - цветовые координаты определенного образца, полученные в эксперименте.

Для получения коэффициентов необходимо производить калибровку перед каждым определением, что занимает много времени и требует точности и соблюдения методики съемки. Современные смартфоны оснащены автоматическими датчиками освещенности (рисунок 13), которые фиксируют интенсивность текущего наружного освещения в люксах. Для стандартизации и выравнивая яркости изображений возможно сравнение

интенсивности уровня яркости текущего освещения с эталонным значением, хранящимся в памяти смартфона.

Яркость освещения действует линейно на каждый цветовой канал, в этом случае поправочные коэффициенты на яркость выражаются как:

$$I_k = \frac{I_n}{I_0}, \quad (27)$$

где I_0 – интенсивность при проведении эталонной съемки;

I_n – интенсивность в условиях эксперимента.



Рисунок 13 – Датчик освещенности смартфона

Также при цифровом анализе изображений существует проблема с нивелированием и стандартизацией теплоты цвета. Экспериментально изучено, что в цветовой системе RGB теплота цвета целиком содержится в линейной комбинации цветовых координатах зеленого (G-канал) и синего (В-канал) цвета. Для определения теплоты цвета и последующем ее устранении приложение захватывает цветовые координаты подложки. Подложкой является обычный белый лист бумаги. Разность между координатами эталонного белого цвета в системе RGB и цветовых координат подложки (листа бумаги) приняли с некоторыми допущениями в качестве поправочного

коэффициента на теплоту цвета. Коэффициент может быть учтен в свободном члене уравнения регрессии.

С учетом сделанных допущений, зависимость концентрации аналита в растворе от колориметрических параметров системы ПММ-окружающая среда описывается следующим уравнением:

$$c = a_{gb} + I_k(a_r R + a_b B + a_g G + a_{rr} R^2 + a_{bb} B^2 + a_{gg} G^2 + a_{rb} RB + a_{rg} RG + a_{bg} B) \quad (28)$$

Задачей исследования является установление возможности определения концентрации аналита по изображению полиметиметакрилатной пластинки. Для этого получены фотографии окрашенных сенсоров, после твердофазной экстракции меди и кобальта, изучены спектры поглощения с целью нахождения максимумов поглощения, построены регрессионные уравнения, описывающие зависимость концентрации аналитов в растворе от цвета ПМММ.

Объектом исследования является прозрачная ПММА пластинка с иммобилизированным ПАН в ее структуру.

Исследования проводились в следующих диапазонах концентраций:

$$C(\text{Cu}) = 0 \div 0,4 \text{ мг/л}$$

$$C(\text{Co}) = 0 \div 0,4 \text{ мг/л}$$

Результаты исследования представлены в таблице 9, рисунках 15-22.

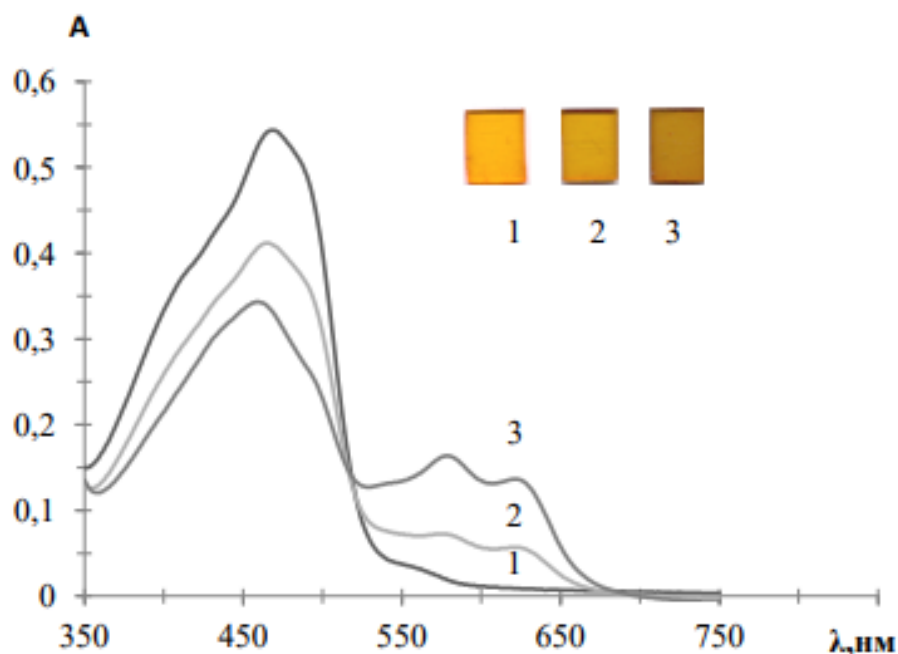


Рисунок 15- Спектры поглощения ПММ с иммобилизованным ПАН после контакта со стандартными растворами Cu^{2+} следующих концентраций: 0,1 мг/л (1), 0,3 мг/л (2), 0,7 мг/л (3).

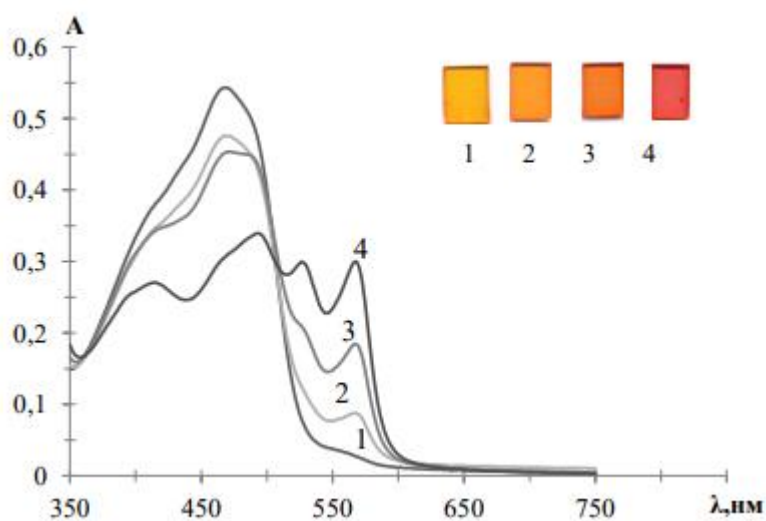


Рисунок 16 - Спектры поглощения ПММ с иммобилизованным ПАН после контакта со стандартными растворами Ni^{2+} следующих концентраций: 0 мг/л (1), 0,1 мг/л (2), 0,2 мг/л (3), 0,3 мг/л (4).

Таблица 9 – Аналитические характеристики поглощения при максимуме длины волны для различных концентраций

C, мг/л	$A_{620}(\text{Cu}^{2+})$	$A_{570}(\text{Ni}^{2+})$
0	0,015	0,02
0,1	0.047	0,09
0,2		0,19
0,3	0.145	0,305
Зависимость	$A_{620} = 2,1971 * C_{620} - 0,0153$	$A_{570} = 1,0273 * C_{570} - 0,0028$
R^2	0.995	0.994

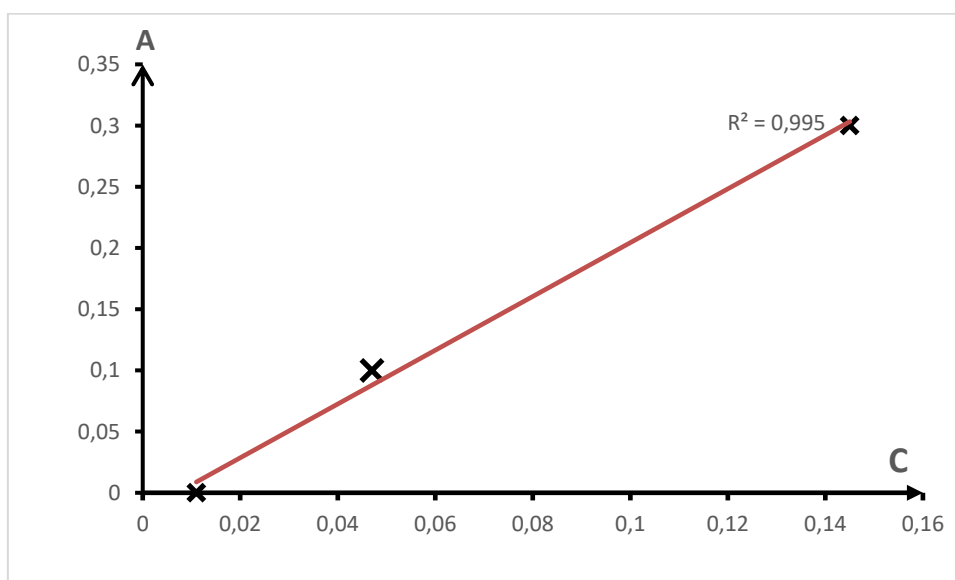


Рисунок 17 – Зависимость оптической плотности матрицы от концентрации меди

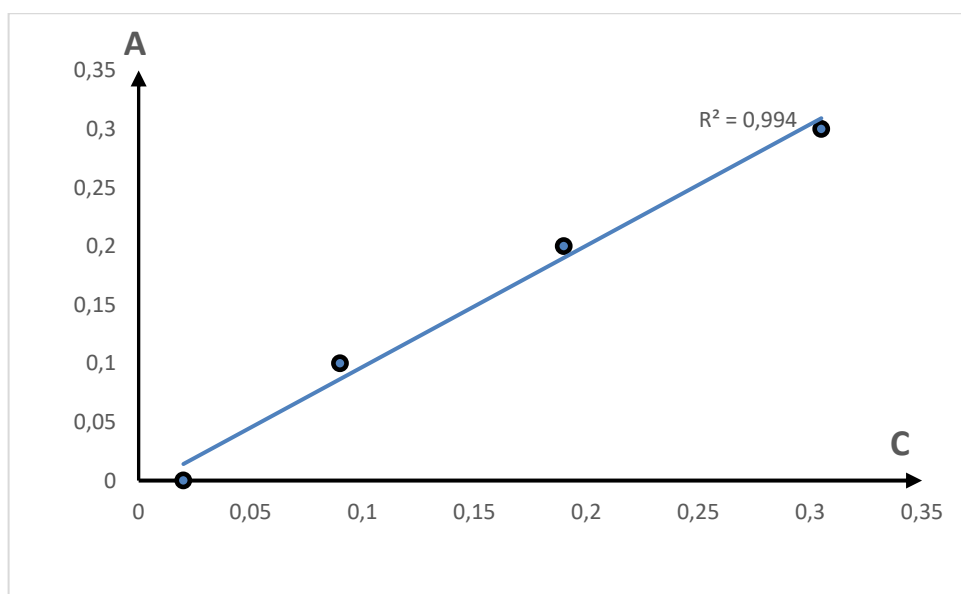


Рисунок 18 – Зависимость оптической плотности ПММ от концентрации никеля

Фотографии ПММА с иммобилизованным Ni^{2+} получены мобильным приложением (рисунок 19)



Рисунок 19 – Фотографии образцов ПММ с Ni^{2+} различных концентраций

С помощью специально разработанного компьютерного программного софта определяли цветовые координаты образцов в координатном пространстве RGB.

Изображение анализируется программой, среднее значение цветовых координат представлено в таблице 10. Цвет может быть представлен в различных стандартизованных моделях: RGB, XYZ, CIE Lab, HSL и др. Для исследования наиболее предпочтительной является RGB-модель, так как это представление, как правило, является неотъемлемой частью интерфейса средств ввода цветовой информации в компьютер и RGB- представление

обеспечивает более линейный характер градуировочной зависимости по сравнению с другими моделями [12].

Таблица 10 - Цветовые координаты, соответствующие различным концентрациям никеля, иммобилизованного в ПММ

R	G	B	C
255	161	79	0
255	169	65	0,05
255	146	89	0,1
255	115	112	0,3
255	99	156	0,5
255	78	186	1

Фотографии образцов (рисунок 20) также проанализированы мобильным приложением.



Рисунок 20 - Фотографии образцов ПММ с Cu^{2+} различных концентраций

Цветовые координаты образцов меди для рисунка 20 представлены в таблице 11.

Таблица 11 - Цветовые координаты, соответствующие различным концентрациям меди, иммобилизированной в ПММ

R	G	B	C
232	241	223	0,1
228	234	199	0,3
220	228	173	0,5
197	201	104	0,7
174	168	39	1

4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

5.1. Предпроектный анализ

5.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования

Для анализа потребителей данного товара необходимо определить сегмент рынка (таблица 12).

Таблица 12– Сегментирование рынка

	Трассерные испытания, контроль ингибиров коррозии, солеотложения, контроль агрессивных сред	Определение химсостава воды на содержание ионов тяжелых металлов	Контроль пищевых красителей
Нефтегазовая отрасль			
Сельское хозяйство			
Пищевая промышленность			

Категорией потребителей данного товара являются коммерческие организации. Потенциальные потребители: нефтяные компании: химическая промышленность; лаборатории контроля качества воды, лаборатории экологического мониторинга, лаборатории биометрических технологий и др. аналитические лаборатории. В зависимости от данной категории потребителей можно провести сегментирование рынка по некоторым признакам:

- демографический признак: города с населением 20–50 тысяч человек, 50–100 тысяч человек, 100–250 тысяч человек, 250–500 тысяч человек, 0,5–1,0 миллионов человек, 1–4 миллиона человек, свыше 4 миллионов человек;

- отрасль: нефтегазовая промышленность, сельское хозяйство, пищевая промышленность, научная отрасль, отрасль водоснабжения и водоотведения.

- предоставляемые услуги: определение содержания металлов в питьевой, природной, сточной воде; установление наличия аскорбиновой кислоты в апельсиновых соках; определение содержания фторидов в зубной пасте;

- размер компании-заказчика: большой, средний и малый.

- размер поставляемых партий товара: заказчикам будут поставляться большие и малые партии.

Из выявленных критериев целесообразно выбрать наиболее значимые для рынка: маркетинговые усилия будут наиболее эффективны на малых предприятиях (в основном аналитические лаборатории), находящихся в крупных развитых городах. Данная разработка в будущем будет пользоваться спросом в различных отраслях хозяйства, на которых намерено ориентироваться предприятие рынка.

5.1.2. Диаграмма Исикавы

Для анализа и формирования причинно-следственных связей, и систематического определения причин проблем используется диаграмма причины-следствия Исикавы (рисунок 20).

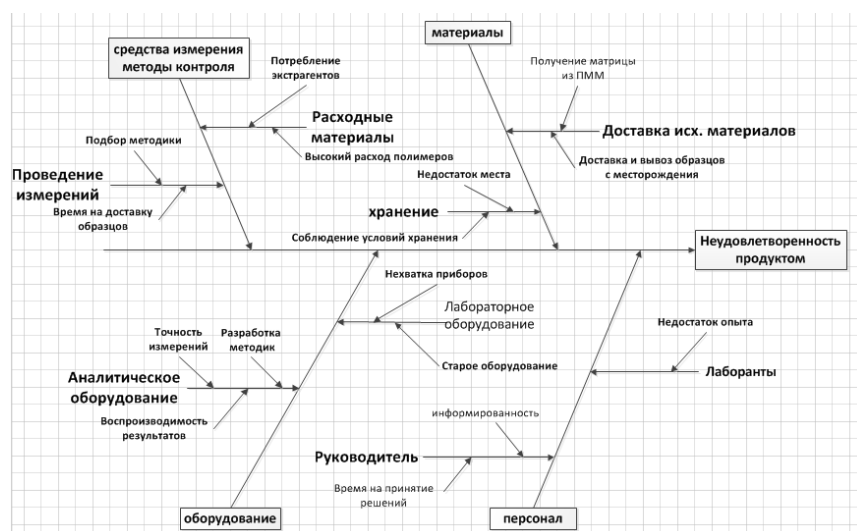


Рисунок 21 - Причинно-следственная диаграмма Исикавы

5.1.3. Оценка готовности проекта к коммерциализации

Оценка готовности проекта к коммерциализации представлена в таблице 13.

Таблица 13 - Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

№ п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1	Определен имеющийся научно-технический задел	3	5
2	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	5	2
3	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	3	4
4	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	3	5
5	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	2	3
6	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	3	4
7	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	5	2
8	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	5	5
9	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	3	4
10	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	4	3

Продолжение таблицы 13

11	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	5	5
12	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	4	1
13	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	4	4
14	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	5	3
15	Проработан механизм реализации научного проекта	5	5
	ИТОГО БАЛЛОВ	58	52

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i,$$

где $B_{\text{сум}}$ – суммарное количество баллов по каждому направлению;

B_i – балл по i -му показателю.

Значение $B_{\text{сум}}$ позволяет говорить о мере готовности научной разработки и ее разработчика к коммерциализации..

5.1.4. Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

Методом коммерциализации научной разработки был выбран инжиниринг. Данный метод подразумевает предоставление на основе договора инжиниринга одной стороной (консультантом), другой стороне (заказчику) комплекса или отдельных видов инженерно-технических услуг, связанных с проектированием, с разработкой новых технологических процессов на предприятии заказчика, усовершенствованием имеющихся производственных процессов вплоть до внедрения изделия в производство и также сбыта продукции.

5.2. Инициация проекта

5.2.1. Цели и результат проекта

Преследуемые цели проекта представлены в таблице 14.

Таблица 14 - Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
НИТПУ	Выпуск квалифицированных специалистов
ООО «Газпромнефть-Восток»	Контроль остаточного содержания ингибиторов НПХ, контроль фильтрационно-емкостных свойств портов при проведении ГРП
Нефтесервисные компании	Экспресс-метод контроля трассеров

В таблице 15 представлена информация о иерархии целей проекта и критериях достижения целей.

Таблица 15 - Цели и результат проекта

Цели проекта:	Исследование состояния месторождений на наличие нефтяных запасов
Ожидаемые результаты проекта:	Из многокомпонентного состава пробы (нефтеводяной эмульсии) полимерная ловушка будет избирательно поглощать в свой объем только молекулы необходимого вещества с последующим изменением цвета
Критерии приемки результата проекта:	Наличие сертификации и соответствие стандарту
Требования к результату проекта:	1. Дешевизна научной разработки 2. Воспроизводимость результатов 3. Надежность результатов 4. Обработка результатов без специального образования

5.2.2. Организационная структура проекта

Структура проекта представлена в таблице 16.

Таблица 16 - Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудо-затраты, дни.
1	Гавриленко Михаил Алексеевич, НИ ТПУ, ОХИ, профессор	Руководитель проекта	Координирует деятельность участников проекта	15
2	Уразов Эльдар Валентинович, НИ ТПУ, кафедра ТОВПМ, магистрант	Исполнитель по проекту	Выполняет отдельные работы по проекту	109
3	Хусаинов Радмир Расимович, ООО «Газпромнефть-Восток», начальник отдела нефтепромысловой химии	Консультант	Консультирование по деталям проекта	30
4	ООО «Газпромнефть-Восток»	Заказчик проекта	Формирует цели проекта, ограничения проекта по срокам и затратам (бюджету)	-
ИТОГО:				174

5.2.3. Ограничения и допущения проекта

Факторы и ограничение проекта представлены в таблице 17.

Таблица 17 - Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/ допущения
Бюджет проекта	456000 руб.
Источник финансирования	Заказчик
Сроки проекта:	
Дата утверждения плана управления проектом	1.08.2018
Дата завершения проекта	

5.2.4. План проекта









План проекта выглядит в соответствии с таблицей 16.

Таблица 18 - Календарный план проекта

Код работы (из ИСР)	Название	Длительность, дни	Количество рабочих дней	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников (ФИО ответственных исполнителей)
1	Введение	9	7	19.02.18	27.02.18	Уразов Э.В.
2	Литературный обзор	12	8	28.02.18	11.03.18	Уразов Э.В.
3	Теоретический анализ	2	2	12.03.18	13.04.18	Уразов Э.В.
4	Постановка задачи исследования	32	22	14.03.18	14.04.18	Гавриленко М.А., Уразов Э.В.
5	Экспериментальная часть	8	6	15.04.18	22.04.18	Уразов Э.В.
6	Результаты и обсуждения	2	2	23.04.18	24.04.18	Гавриленко М.А., Уразов Э.В.
7	Разработка презентации и раздаточного материала	18	10	25.04.18	12.05.18	Уразов Э.В.
8	Оформление	18	14	13.05.18	30.05.18	Уразов Э.В.
Итого:		101	71			

Диаграмма Ганта представлена в таблице 17.

Таблица 19 - Календарный план-график проведения НИР

Код работы (из ИСР)	Вид работ	Исполнители	Т _к , кал, дн.	Продолжительность выполнения работ			
				февраль	март	апрель	май
1	Введение	Магистрант					
2	Литературный обзор	Магистрант					
3	Теоретический анализ	Магистрант					
4	Постановка задачи исследования	Руководитель, магистрант					
5	Экспериментальная часть	Магистрант					
6	Результаты и обсуждения	Руководитель, магистрант					
	Разработка презентации и раздаточного материала	Магистрант					
	Оформление	Магистрант					



- Руководитель



- Магистрант

5.3. Бюджет научного исследования

Расчет стоимости материальных затрат производится по действующим прейскурантам или договорным ценам. Результаты по данной статье заносятся в таблицу 20, 21 и 22.

Таблица 20 - Расчет затрат на сырье и материалы

№ п/п	Наименование затрат	Единица измерений	Расход	Цена за единицу, руб	Сумма, руб
1	Бумага фильтровальная	упаковка	1	120,00	120,00
2	Ручка	шт	1	5,00	5,00
3	Соляная кислота	л	1	75,00	75,00
4	ПБ	кг	2	225,00	450,00
5	ММА	кг	5	100,00	500,00
6	ПЭГ	кг	1	80,00	80,00
Итого					6630,00

Таблица 21 - Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во	Стоимость, руб.	Норма амортизации, %	Амортизация, руб
1	Весы лабораторные аналитические	1	40000	15	6000
2	Весы лабораторные технические	1	14870	15	2230,5
3	Электроплитка, 800 Вт	1	1000	15	
4	Сушильный шкаф	1	25250	15	3787,5
5	Колба коническая	10	1020	15	
6	Чашка Петри	1	5000	15	
7	Лабораторный вакуумный фильтр	1	1100	15	
8	Воронка с перегородкой	3	300	15	
9	Полимеризационная пресс-форма	3	900	15	
10	Шприц пластиковый	10	100	15	
11	Электромеханический вибросмеситель	1	1800	15	270
12	Спектрофотометр	1	36000	15	5400
14	Комплект пипеток	1	250	15	
15	Комплект мерных колб	1	400	15	
16	Палочка стеклянная	3	120	15	
17	Шпатель	3	165	15	
18	Пинцет	2	105	15	
19	Вытяжной шкаф	1	20500	15	3075
	ИТОГО		163425		
	За период выполнения НИР				32723

Таблица 22 - Группировка затрат по статьям

Вид работ	Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты	Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	Основная заработная плата	Отчисления на социальные нужды	Накладные расходы	Итого плановая себестоимость
1.	6630,00	32723	100764,5	22817,25	80611,6	256701,35

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением проекта, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату.

$$C_{ЗП} = З_{осн} + З_{доп},$$

где $З_{осн}$ – основная заработная плата; $З_{доп}$ – дополнительная заработная плата.

Основная заработная плата ($З_{осн}$) руководителя (лаборанта, инженера) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле:

$$З_{осн} = З_{дн} * T_{раб},$$

где $З_{осн}$ – основная заработная плата одного работника; $T_{раб}$ – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб.дн. (табл. 36); $З_{дн}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$З_{дн} = \frac{З_{м} * M}{F_{д}},$$

где $З_{м}$ – месячный должностной оклад работника, руб.; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 24 раб.дня M

=11,2 месяца, 5-дневная неделя; при отпуске в 48 раб.дней М=10,4 месяца, 6-дневная неделя; в нашем случае без отпуска М=3,4 месяца, 5-дневная неделя; F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб.дн.

Таблица 23 - Баланс рабочего времени одного исполнителя НИР

Показатели рабочего времени	Исполнитель
Календарное число дней	365
Количество нерабочих дней	
- выходные дни	52
- праздничные дни	14
Номинальный фонд рабочего времени	299
Потери рабочего времени	
- отпуск	48
- невыходы по болезни	-
Эффективный фонд рабочего времени	251

Месячный должностной оклад работника:

$$З_m = З_б * (k_{пр} + k_d) * k_p,$$

где $З_б$ – базовый оклад, руб.; $k_{пр}$ – премиальный коэффициент, (определяется Положением об оплате труда); k_d – коэффициент доплат и надбавок (в НИИ и на промышленных предприятиях – за расширение сфер обслуживания, за профессиональное мастерство, за вредные условия: определяется Положением об оплате труда); k_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 23.

Таблица 24 - Расчёт основной заработной платы

Исполнители	Оклад руб.	$k_{пр}$	k_r	$З_m$, руб	$З_{дн}$, руб.	T_r , раб.дн.	$З_{осн}$, руб.
Руководитель	32050	1,12	1,3	46664,8	1993,5	15	29902,5
Магистрант	2520	1,12	1,3	3669	152	109	16568
Консультант	30000	1,12	1,3	43680	1809,8	30	54294
Итого							100764,5

Рассчитываем отчисления на социальные нужды (27,1%):

$$Q_{\text{соц.рук}} = 0,271 * 86640 = 22817,25 \text{ руб}$$

Таблица 25 - Заработанная плата исполнителей НИР

	Заработная плата, руб	Социальные отчисления, руб
Руководитель	29902,5	8103,6
Исполнитель	16568	
Консультант	54294	14713,7
ИТОГО	100764,5	22817,25

5.3.1. Накладные расходы

Данный пункт включает затраты на управление и хозяйственное обслуживание, которые могут быть отнесены непосредственно на конкретную тему. Кроме того, сюда относятся расходы по содержанию, эксплуатации и ремонту оборудования, производственного инструмента и инвентаря, зданий, сооружений и др. В расчетах эти расходы принимаются в размере 70 - 90 % от суммы основной заработной платы научно-производственного персонала данной научно-технической организации [83].

Расчет накладных расходов ведется по следующей

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (3_{\text{осн}} + 3_{\text{доп}})$$

$$C_{\text{накл}} = 0,8 \cdot 100764,5 = 80611,6$$

где $k_{\text{накл}}$ – коэффициент накладных расходов.

5.3.2. Организационная структура проекта

В данном проекте выбрана проектная организационная структура так как проект несет в себе научную новизну, имеются неопределенности в реализации научного знания.

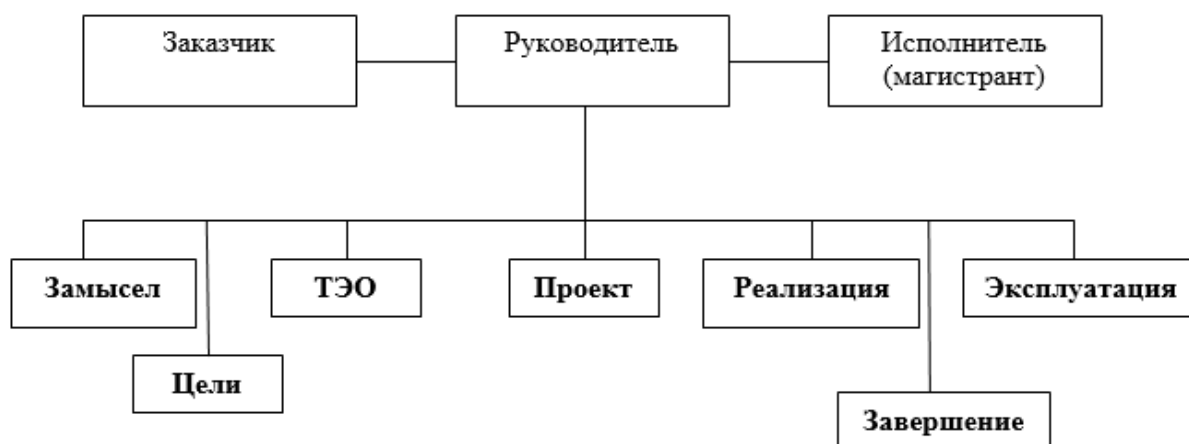


Рисунок 30 - Организационная структура проекта

5.3.3. План управления коммуникациями проекта

План управления коммуникациями показывает требования к коммуникациям со стороны участников проекта, таблица 25.

Таблица 26 - Пример плана управления коммуникациями

№ п/п	Какая информация передается	Кто передает информацию	Кому передается информация	Когда передает информацию
1.	Статус проекта	Руководитель проекта	Представителю заказчика	Ежеквартально (первая декада квартала)
2.	Обмен информацией о текущем состоянии проекта	Исполнитель проекта	Участникам проекта	Еженедельно (пятница)

Продолжение таблицы 26

3.	Документы и информация по проекту	Ответственное лицо по направлению	Руководителю проекта	По мере поступления информации
----	-----------------------------------	-----------------------------------	----------------------	--------------------------------

5.3.4. Реестр рисков проекта

Для прогнозирования событий, которые могут возникнуть в проекте и вызвать последствия, которые повлекут за собой нежелательные эффекты, рассмотрим идентифицированные риски проекта, приведенные в таблице 27.

Таблица 27 - Реестр рисков

№	Риск	Потенциальное воздействие	Вероятность наступления	Влияние риска	Уровень риска*	Способы смягчения риска
1	Качество	Снижение уровня продаж	2	3	средний	Улучшение технологии производства
2	Безопасность продукта	Повышение токсичности продукта	1	2	низкий	Соблюдение условий проведения исследования
3	Технология	Дополнительные затраты, снижение производительности	3	4	высокий	Улучшение технологий
4	Поставщики	Снижение производительности	2	3	средний	Сотрудничество с крупными организациями
5	Предписания контрольных органов	Изменение технологии производства	3	3	средний	Следование предписаниям
6	Рынок	Изменение технологий проведения анализа	3	4	высокий	Постоянный анализ рынка

Продолжение таблицы 27

7	Заказчик	Снижение спроса на исследования	3	5	высокий	Четкое соблюдение условий договора
8	Скорость проведения анализов	Снижение производительности	2	3	средний	Закупка нового оборудования
9	Финансирование	Снижение производительности	4	4	высокий	Поддержание интереса у инвесторов
10	Оценки	Искаженные данные о производстве	2	3	средний	Проведение аттестаций
11	Планирование	Снижение производительности	2	2	низкий	Составление оптимального расписания работ

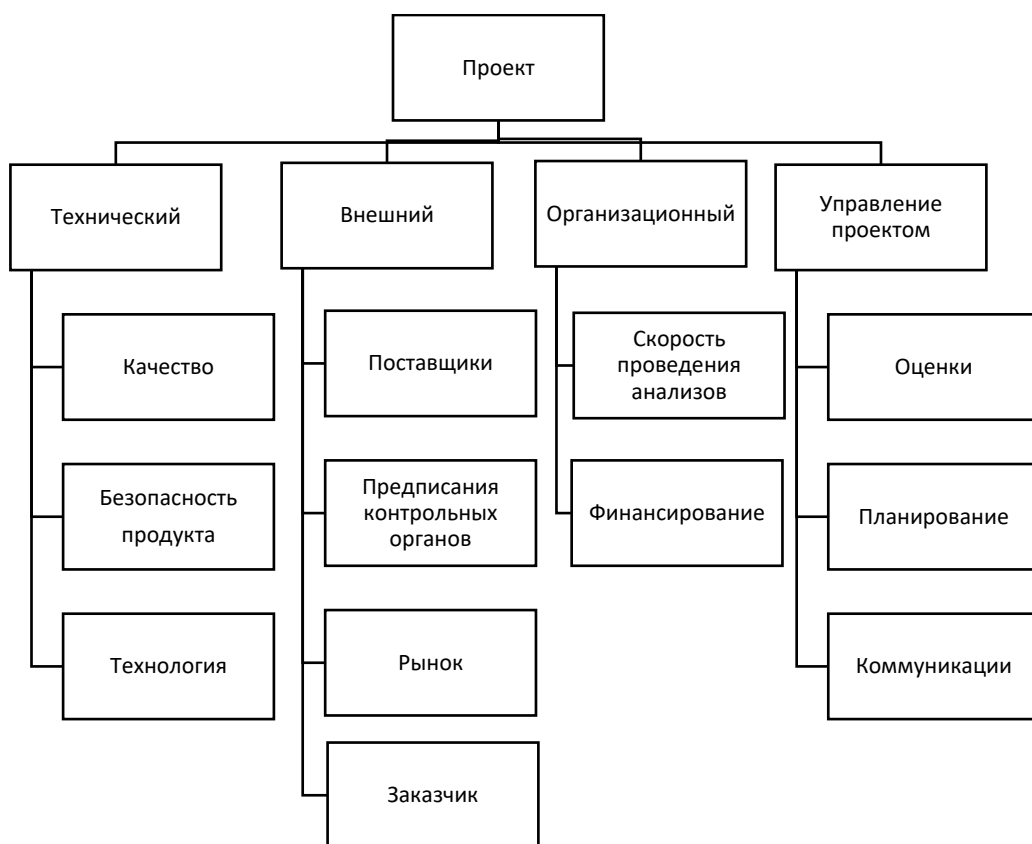


Рисунок – 22 Пример иерархической структуры рисков

5.4. Оценка сравнительной эффективности исследования

Для оценки эффективности сгруппируем затраты по статьям (таблица 27).

Таблица 28 – Группировка затрат по статьям аналогов разработки

Вариант исполнения	Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты	Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	Основная заработная плата	Отчисления на социальные нужды	Накладные расходы	Итого плановая себестоимость
Р	6630	45878	100764,5	22817,25	80611,6	256701,35
A1	8000	230000	235000	63685	188000	724685
A2	1700	160000	121623	32959,8	97298,4	413581,2

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\Phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}} = \frac{256701,35}{724685} = 0,35$$

$$I_{\Phi}^{a1} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}} = \frac{724685}{724685} = 1$$

$$I_{\Phi}^{a2} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}} = \frac{413581,2}{724685} = 0,57$$

где I_{Φ}^p - интегральный финансовый показатель разработки;

Φ_{pi} – стоимость i-го варианта исполнения;

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное удешевление стоимости разработки в разы.

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить следующим образом:

$$I_m^a = \sum_{i=1}^n a_i b_i^a, \quad I_m^p = \sum_{i=1}^n a_i b_i^p,$$

где I_m – интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов;

a_i – весовой коэффициент i -го параметра;

b_i^a, b_i^p – бальная оценка i -го параметра для аналога и разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности рекомендуется проводить в форме таблицы, пример которой приведен ниже.

Таблица 29 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Способствует снижению стоимости анализа	0,3	5	3	1
2. Способствует увеличению скорости получения результатов	0,1	5	3	1
3. Легкая пробоподготовка	0,1	4	2	1
4. Точность результатов	0,35	4	5	5
5. Легкая интерпретация результатов	0,15	5	3	1
ИТОГО	1	28	22	19

$$I_m^p = 5 * 0,3 + 5 * 0,1 + 4 * 0,1 + 4 * 0,35 + 5 * 0,15 = 4,65$$

$$I_1^A = 3 * 0,3 + 3 * 0,1 + 2 * 0,1 + 5 * 0,35 + 3 * 0,15 = 3,6$$

$$I_2^A = 1 * 0,3 + 1 * 0,1 + 1 * 0,1 + 5 * 0,35 + 1 * 0,15 = 2,4$$

Интегральный показатель эффективности разработки ($I_{\text{финр}}^p$) и аналога ($I_{\text{финр}}^a$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_{\phi}^p},$$

$$I_{финр}^a = \frac{I_m^a}{I_{\phi}^a}$$

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_{\phi}^p} = \frac{4,65}{0,35} = 13,3$$

$$I_{финр}^{a1} = \frac{I_m^{a1}}{I_{\phi}^{a1}} = \frac{3,6}{1} = 4,86$$

$$I_{финр}^{a2} = \frac{I_m^{a2}}{I_{\phi}^{a2}} = \frac{2,4}{0,57} = 4,21$$

Сравнение интегрального показателя эффективности текущего проекта и аналогов позволит определить сравнительную эффективность проекта. Сравнительная эффективность проекта:

$$\mathcal{E}_{ср} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^a}$$

$$\mathcal{E}_{ср} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^{a1}} = \frac{13,3}{4,86} = 2,74$$

$$\mathcal{E}_{ср} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^{a2}} = \frac{7,88}{4,21} = 3,16$$

где $\mathcal{E}_{ср}$ – сравнительная эффективность проекта; $I_{мэ}^p$ – интегральный показатель разработки; $I_{мэ}^a$ – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Таблица 30 - Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Разработка	Аналог 1	Аналог 2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,35	1	0,57
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,65	3,6	2,4
3	Интегральный показатель эффективности	13,3	4,86	4,21
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения		2,74	3,16

Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволило определить, что существующий вариант решения поставленной в

магистерской диссертации технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности является наиболее приемлемым.

Проведя анализ показателей эффективности, получили сравнительную эффективность проекта 2,74 с первым аналогом и 3,16 со вторым аналогом. Таким образом, инвестиционный проект считается выгодным.

Выводы

Результаты проведенного нами анализа по определению ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования позволяют сделать некоторые частные выводы, представляющие интерес для дальнейшего исследования данной научной разработки:

- коммерческая привлекательность данного научного исследования превысила технические параметры над предыдущими аналогами, что говорит о его значительном преимуществе,
- продукт быстро и беспрепятственно вышел на рынок, а также стал востребован рынком, поскольку его цена удовлетворила потребителя,
- себестоимость технологии производства мала, что говорит о быстрой окупаемости проекта и быстрого получения при.

6. Социальная ответственность

6.1. Вредные факторы

6.1.1. Характеристика рабочей зоны

Рабочее место лаборанта оборудовано необходимыми приборами, вспомогательными приспособлениями, оснащено реактивами, лабораторной посудой, расчетными таблицами, счетными линейками. Рабочее место лаборанта химического анализа полимеров предусматривает проведение лабораторных работ, постановку синтезов полимеров, проведение расчетов по химическому анализу, а также исследование полученных веществ с помощью химических средств, приборов и лабораторного оборудования.

Химическая лаборатория расположена в помещении с естественным освещением, отоплением, водопроводом и канализацией. Данное помещение лаборатории обеспечено первичными средствами пожаротушения и оборудовано средствами автоматической пожарной сигнализации. В лабораторном помещении имеется приточно-вытяжная вентиляция с механическим побуждением, а вытяжные шкафы оборудованы верхними и нижними местными отсосами.

В лаборатории можно выделить следующие вредные факторы [44]:

- физические;
- химические.

6.1.2. Физические вредные факторы:

- повышенная или пониженная температура поверхностей оборудования, материалов. Нагревательные приборы и нагретые оборудования могут привести к термическим ожогам, пожару и взрыву.

- повышенная или пониженная температура воздуха рабочей зоны. Лаборатория имеет автоматическую систему поддержания нормируемой температуры воздуха с помощью кондиционеров и обогревателей;

- повышенная запыленность и загазованность воздуха рабочей зоны. В лабораториях отсутствуют источники образования пыли;

- повышенная или пониженная подвижность воздуха- движущееся оборудование, подвижные части;

- в лабораториях имеются движущиеся и подвижные части, которые могут привести к травмированию;

- острые кромки, заусенцы и шероховатость на поверхностях заготовок, инструментов, оборудования.

- шум;

6.1.3. Химические вредные факторы:

Используемые вредные вещества описаны ниже.

– Метилметакрилат (ММА)

В производстве ПММА наиболее токсичным веществом является мономер ММА. При воздействии высоких концентраций последнего возможны острые отравления с раздражением глаз, верхних дыхательных путей, тошнотой, рвотой, головной болью и головокружением. В тяжелых случаях может быть потеря сознания. Попадание ММА на кожу вызывает ожог. При длительном воздействии повышенных концентраций ММА возможна хроническая интоксикация с ведущими нарушениями нервной системы.

– Бензоила перекись (ПБ)

ПБ обладает токсическим действием общего и местного характера. При попадании на кожу и слизистые оболочки вызывает ожоги. Опасности, связанные с сухим бензоил пероксидом могут быть значительно снижены при разбавлении его нерастворяющими разбавителями, которые поглощают теплоту реакции разложения и обеспечивают другие преимущества.

– Полиэтиленгликоль (ПЭГ)

Вызывает поражение центральной нервной и дыхательной систем, печени, почек, мочевыводящих путей, слабо раздражает кожу, раздражает слизистые оболочки глаз. Оказывает слабое кумулятивное действие. С повышением молекулярной массы токсичность ПЭГ уменьшается.

– Родамин

Родамин высокотоксичное вещество, легко распыляется на воздухе. Все работы с использованием сухого родамина проводятся исключительно в респираторах. Родамин ядовит, при вдыхании приводит к сильнейшему раздражению слизистых оболочек.

– Соляная кислота

Соляная кислота оказывает раздражающее действие на верхние дыхательные пути, кожу, глаза. При попадании концентрированного раствора в желудок – загрудинные боли, ожог полости рта, рвота с кровью, позже некрозы внутренних органов, перфорация пищевода и желудка, деструкция ВДП.

В соответствии с нормативными документами установлены предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ для воздуха рабочей зоны в производственных помещениях.

Перечень загрязняющих веществ, выбрасываемых в воздух рабочей зоны и их ПДК представлены в таблице 31.

Таблица 31 - Перечень загрязняющих веществ [45,46]

Наименование загрязняющих веществ	Класс опасности	ПДК м.р. мг/м ³	ПДК с.с. мг/м ³
ММА	3	0,1	0,01
ПБ	3	5,0	-
ПЭГ	4	10	-
Родамин	2	0,4	-
Соляная кислота	2	0,2	0,1

Для соблюдения мер безопасности при работе в лаборатории, во время выделения вредных газообразных веществ, предусмотрены следующие мероприятия:

- соблюдение мер личной гигиены;
- система вентиляционных сооружений;
- применение средств индивидуальной защиты (респираторы, резиновые перчатки, спецодежда) [47-51];
- ежедневная уборка рабочей зоны.

Остальные, вещества, используемые в работе (эозин, вода дистиллированная, ПММА и т.д.) являются безопасными для здоровья и окружающей среды.

6.2. Опасные факторы

6.2.1. Электробезопасность

Данная химическая лаборатория попадает под класс помещений с особой опасностью, поскольку всё электрооборудование является потенциально электроопасным. Особая опасность обусловлена возможностью воздействия на электрооборудование химически активных сред.

Источниками такой опасности в лаборатории могут быть: технические весы, сушильный шкаф, муфельная печь, электрические плитки, лампа вспомогательного местного освещения и др.

Электробезопасность в научно-исследовательской лаборатории соблюдалась в соответствии с [52,53].

Питание электроприборов лаборатории осуществлялось от щита с разделительными трансформаторами, подсоединенного к электрическому вводу через защитно-отключающее устройство.

В электроустановках напряжением от 110 до 750 кВ выполнено защитное заземление.

6.2.2. Пожарная безопасность

В исследовательской лаборатории в ходе проведения работ применялись горючие вещества (ММА, ПБ). При взаимодействии указанных веществ с воздухом может возникать опасность образования горючих смесей, что влечет за собой возможность пожара.

Для обеспечения пожарной безопасности в лаборатории приняты данные меры предосторожности [54, 55]:

- наличие пожарной сигнализации;
- поддержание в исправном состоянии электропроводки, технологического оборудования, измерительных электроприборов, приточно-вытяжной вентиляции;
- пожарный инвентарь (порошковые огнетушители ОП-5, ящики с просеянным песком, ведра, асбестовое полотно).

В соответствии с нормативными требованиями, лаборатория оснащена порошковыми и углекислотными (ОУ–10) огнетушителями.

Перечень пожароопасных веществ представлен в табл. 38.

Рабочий стол и вытяжной шкаф, предназначенные для работы с пожаро- и взрывоопасными веществами, покрыты несгораемым материалом (для работы с кислотами, щелочами и другими химически активными веществами - материалами, стойкими к их воздействию).

Таблица 32 - Характеристика взрыво- и пожароопасных веществ

Наименование	Т. всп., °С	Т. воспл., °С	Т. самовоспл., °С	Характеристика опасности	Приемлемые средства пожаротушения
ММА	10	20	440	<ul style="list-style-type: none">• Горючий материал. Пары тяжелее воздуха и могут распространяться по полу.• Образует взрывчатые смеси с воздухом при температуре окружающей среды. Взрывоопасная концентрация его в воздухе составляет 1,47÷12,5 % об.	Углекислый газ (CO ₂), пена, сухой порошок

Продолжение таблицы 32

ПБ (сухая)	106—108 (разложение со вспышкой)	-	144	<ul style="list-style-type: none"> • Горючее вещество. Поддерживает горение из-за выделения кислорода. • Избегать удары и трение. • В случае возгорания возможно образование вредных газообразных продуктов. • Бурно реагирует с многими органическими и неорганическими кислотами, спиртами и аминами. • Влажная ПБ при комнатной температуре невзрывоопасна. 	Углекислый газ (CO ₂), пена, сухой порошок, вода
ПЭГ	154	162	340	<ul style="list-style-type: none"> • Возможна термодеструкция. • Образующиеся продукты: оксиды углерода. • Отравление оксидами углерода вызывает головную боль, головокружение. 	При небольших возгораниях – углекислый газ (CO ₂), (огнетушитель углекислотный ОУ-5), вода.

6.3. Экологическая безопасность

При работе лаборатории образуются специфические отходы химических веществ, преимущественно в виде различных сливов и остатки химических реактивов, не подлежащие дальнейшему использованию (данный вид отхода (по ФККО: лабораторные отходы и остатки химикалий; код – 5930000000000 [56]) согласно современной классификации отходов производства и потребления представляет повышенную опасность как для здоровья человека, так и для окружающей природной среды). Лабораторные отходы на 90% состоят из отработанных испытуемых образцов (сливы, твердые материалы), загрязненных продуктами испытаний, и на 10% из химреагентов и веществ, как потерявших свои потребительские свойства. Известно несколько способов утилизации лабораторных отходов и остатков химикалий:

- сжигание;
- высокотемпературная обработка с доступом и без доступа кислорода;

- захоронение;
- безотходная переработка (превращение в добавку для производства цемента).

Данная лаборатория является практически безотходной, поэтому отработанные реактивы и ядовитые вещества, остатки веществ после анализа сливаются в специальную посуду и отправляются на регенерацию или уничтожение.

Раздельный сбор отходов признан основным стратегическим способом снижения остроты экологических проблем. Применительно к лабораторным отходам предлагается выделять следующие виды сливов:

- сливы сильных концентрированных (10% и более) кислот;
- сливы сильных концентрированных (10% и более) восстановителей;
- сливы водных разбавленных (менее 10%) кислот, щелочей, солей;
- сливы не галогенированных растворителей;
- сливы галогенированных растворителей;
- сливы элементоорганических соединений;
- индивидуальные сливы особо реакционных или токсичных веществ.

6.3.1. Защита в чрезвычайных ситуациях

Чрезвычайная ситуация — это состояние, при котором в результате возникновения источника ЧС на объекте, определенной территории или акватории нарушаются нормальные условия жизни и деятельности людей, возникает угроза их жизни и здоровью, наносится ущерб имуществу населения, народному хозяйству и природной среде.

К чрезвычайным ситуациям в лаборатории можно отнести пожары, взрывы, выбросы химически опасных веществ.

Согласно ППБ – 03 химическая лаборатория университета относится к категории В. Основными источниками возникновения пожара и взрыва в химической лаборатории могут быть:

- неисправные электроприборы
- неисправная электропроводка
- возгорание ЛВАЖ либо ГЖ
- курение в неположенном месте
- работа с открытым огнем либо использование приборов с открытыми источниками накаливания

6.3.2. Технические меры по предотвращению возгорания

Для предотвращения процессов горения на территории лаборатории установлена пожарно – охранная сигнализация с датчиками, установленными на потолке помещения и реагирующими на содержание угарного газа. Также имеются тревожные кнопки, защищенные пластиковой крышкой от случайного срабатывания.

Пожарный шкаф с пожарным краном и рукавом длиной 25 м внутри. Внешнее оформление пожарного шкафа соответствует ГОСТ 12.4.009 , п. 2.5.10. Также в пожарном шкафу и в помещении инженера находятся порошковые огнетушители.

Все ЛВАЖ и ГЖ хранятся в металлическом, герметичном шкафу.

Для организации беспрепятственной эвакуации на стенах помещения на уровне глаз установлены планы эвакуации в случае пожара. Эвакуационные выходы из помещения имеют соответствующие надписи с подсветкой. Также, согласно постановлению государства запрещено курить в местах общего пользования согласно Федеральному закону от 23.02.2013 N 15-ФЗ "Об охране здоровья граждан от воздействия окружающего табачного дыма и последствий потребления табака" и пожаро- взрывоопасных местах.

6.3.3. Выбросы и проливы химических веществ

В общем случае, проливы могут быть ликвидированы персоналом лаборатории или специализированными аварийными бригадами предприятия или аварийными службами МЧС. Персонал лаборатории должен быть проинструктирован в каких случаях ликвидация пролива может быть проведена собственными силами, а в каких случаях необходимо покинуть место пролива, оповестить персонал предприятия и вызвать аварийную службу МЧС.

6.4. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

Рабочее время, отпуск, компенсации. В силу ст. 92 ТК РФ работникам, занятым на работах с вредными или опасными условиями труда, работодатель обязан установить сокращенное рабочее время – не более 36 часов в неделю. Кроме этого, ст. 94 ТК РФ установлена максимально допустимая продолжительность ежедневной работы (смены) для работников, занятых на вредных и опасных работах, которая не должна превышать:

- при 36-часовой рабочей неделе – 8 часов;
- при 30-часовой рабочей неделе и менее – 6 часов.

По общему правилу, указанному в ст. 146 ТК РФ оплата труда в особых условиях должна производиться в повышенном размере.

Обеспечение работников СИЗ. На основании ст. 212 ТК РФ работодатель обязан обеспечить (прошедших обязательную сертификацию) средствами индивидуальной и коллективной защиты работников. Работники, которые заняты на работах с вредными или опасными условиями труда, имеют право на обеспечение средствами индивидуальной и коллективной защиты согласно требованиям охраны труда, за счет средств работодателя (ст. 219 ТК РФ). В данную категорию входят изолирующие костюмы, специальная одежда, средства защиты ног, рук, головы, лица, глаз, органов

дыхания, слуха, средства защиты от падения с высоты, а также защитные дерматологические средства и др. [57]

Смывающие и обезвреживающие средства. Данная работа во вредных условиях труда связана также с сильным загрязнением, поэтому работодатель обязан обеспечить работников смывающими и обезвреживающими средствами. Нормы выдачи таких средств утверждены соответствующим нормативным документом [58]. Эти средства (очищающие средства в виде твердого туалетного мыла или жидких моющих средств (гель для рук, гель для тела и волос, жидкое туалетное мыло и другие) выдаются один раз в месяц в соответствующем количестве в зависимости от вида выполняемых работ и производственных факторов.

Молоко и лечебно-профилактическое питание. Работодатель обязан обеспечить работникам, занятыми на работах с вредными условиями труда, бесплатную выдачу молока или других равноценных пищевых продуктов (ст. 222 [59]). В нормативном документе [60] указан перечень вредных производственных факторов, при воздействии которых рекомендуется употребление молока или других равноценных пищевых продуктов, Этим же документом установлены нормы и условия выдачи молока.

Медицинские осмотры (освидетельствования). Вредные и опасные производственные факторы и работы, при выполнении которых проводятся обязательные предварительные и периодические медицинские осмотры (обследования), а также порядок их проведения определены в нормативном документе [61]. Работники, которые заняты на тяжелых работах, а также на работах с вредными или опасными условиями труда, должны проходить обязательные предварительные (при поступлении на работу) и периодические (для лиц в возрасте до 21 года – ежегодные) медицинские осмотры и обследования (ст. 213 [61]).

Досрочная пенсия. В связи с работой с особо вредными условиями труда сохраняется право на досрочное назначение трудовой пенсии [62].

Выводы

- Исследованы закономерности формирования цветометрического сигнала в полимерной матрице от концентрации аналита и цветовых характеристик оптода;
- Предложено применение цветовой системы RGB как оптимальной цветовой системы для цветометрического анализа;
- Разработаны математические методы интерпретации цветового сигнала как функции концентрации целевого вещества;
- Разработан программный комплекс для изыскания регрессионного уравнения и реализации цветометрического определения аналитов с помощью смартфона.

Список использованной литературы

1. Серова В.Н. Оптические и другие материалы на основе прозрачных полимеров: монография. – Казань: КГТУ, 2010. - С. 56– 108
2. Зверев В.А., Кривоступова Е.В., Точилина Т.В. Оптические материалы: учебное пособие. – М.: Проспект, 2013. – С.105–122
3. Esha V. Shah etc. Optical and thermodynamic behavior on the polymerization of PMMA: A DFT investigation // Comp. Biochem. Physiol. A: Mol. Integr. Physiol. - 2018, - Vol. 72, P. - 192-198
4. Gründler P. Chemical sensors: an introduction for scientists and engineers. – Berlin: Springer. 2007. -P. 274 .
5. Kattrall R. W. Chemical sensors. Oxford University Press. 1997. –P.80
6. Mohr G. J.. Materials and Polymers in Optical Sensing // J. Proc. R. Inst. Chem. - 2002, P. 201-219.
7. Wang C. etc. Effects of additives on PVC plastics surface and the natural flotability, colloids and Surfaces // Colloids Surf., A. – 2014. - Vol. 441. P.- 544-548.
8. McDonagh C. Optical Chemical Sensors // Chem. Rev. – 2008. - Vol. 108. - P. 400-422
9. Li Y.S. etc. Introduction to colorimetry // J. Soc. Dyers Colour.– 1999. - Vol. 115. - P. 95
10. Deo H.T., Desai B.K. Study of color properties // J. Soc. Dyers Colour.– 1999. - Vol.115. p. 224
11. Gillchrist A., Nobbs J. Optical world //J. Soc. Dyers Colour. – 2007. - Vol. - 115. - P.14
12. Martins A. R., Paciornik S., Pereira J. A. S. Proceedings of IMEKO 2000 /// Int.J. Metrol. Qual. Eng. – 2000. - Vol. 9. - P.121-126
13. Химченко С., Экспериандова Л. Сравнение аналитических возможностей вариантов детектирования в цветометрическом экспресс-анализе с помощью портативных инструментов // Ж. анал. хим. – 2012. – Т. 67. - № 8. - С. 777–781
14. Miller J.C., Miller J.N. Statistics for Analytical Chemistry. - Pearson Education Canada. 1993. – P.296
15. Mohr G. J. Polymers for optical sensors. - Dodrecht: Springer. 2008. - P. 297-321.
16. Collision M. M., Howels A. R. Chemical Sensor // Anal. Chem. – 2000. – Vol. 39. – P. 600-618.
17. Золотов Ю.А., Иванов В.М., Амелин В.Г. Химические тест – методы // Ж. анал. хим. – 2002. — С. 197-204
18. Золотов Ю.А., Цизин Г.И., Моросанова Е.И., Дмитриенко С.Г. Сорбционное концентрирование микрокомпонентов для целей химического анализа // Усп. хим. – 2005. – Т. 74. – №1. – С.41-66.
19. Gavrilenko N.A., Saranchina N.V. Analytical properties of 1-(2-pyridylazo)-2-naphthol immobilized on a polymethacrylate matrix // J. Anal. Chem. – 2009. –Vol.69. –P. 226-230.

20. Gavrilenko N.A etc. Redox and acid-base properties of 2,6-dichlorophenolindophenol immobilized on a polymethacrylate matrix // J. Anal. Chem. – 2010. – Vol. 65. –P. 17-20.
21. Apyari V.V., Dmitrienko S.G., Zolotov Y.A. Polyurethane Foams in Chemical Analysis: Sorption of Various Substances and Its Analytical Applications // M. Univ. Chem. Bull. – 2011. Vol. 66. – P. 32
22. Shishkin Y.L., Dmitrienko S.G., Medvedeva O.M. Use of a Scanner and Digital Image-Processing Software for the Quantification of Adsorbed Substances // J. Anal. Chem – 2004. – Vol. 59. – P.102
23. Apyari V.V., Dmitrienko S.G. Using a digital camera and computer data processing for the determination of organic substances with diazotized polyurethane foams// J. Anal. Chem. -2008. – Vol.63. -№6. –P. 530-537
24. Breslauer D.N. etc. Mobile phone based clinical microscopy for global health applications // PLoS ONE. –2009. - Vol. 4. - P. 632-639
25. Kim C. etc. A smartphone-based optical platform for colorimetric analysis of microfluidic device // Sens. and Act. Chem. – 2016. – P.239.
26. Tseng A. .etc. Lensfree microscopy on a cellphone // Lab chip – 2010. - Vol. 14. P. 1787–1792
27. Ozcan A. etc. Cellphone-based devices for bioanalytical sciences // Anal. Bioanal. Chem. – 2014. –Vol. 406. – P.3263–3277.
28. Ozcan A. etc. A personalized food allergen testing platform on a cellphone // Lab Chip – 2013. – Vol. 13. – P. 636–640
29. Vashist S.K. etc. Graphene-based rapid and highly-sensitive immunoassay for C-reactive protein using a smartphone-based colorimetric reader // Biosens. Bioelectron. – 2015. –Vol. 66. –P. 166-169
30. Oncescu V., O'Dell D., Erickson D. Smartphone technology can be transformative to the deployment of lab-on-chip diagnostics // Lab Chip. - 2013. –Vol. 13. –P. 3232–3238
31. Shen L., Hagen J.A., Papautsky I. Design and Development of Aptamer–Gold Nanoparticle Based Colorimetric Assays for In-the-field Applications // Lab Chip. -2012. –Vol. 12. –P. 4240–4243
32. Wei Q. etc. Detection and spatial mapping of mercury contamination in water samples using a smart-phone // ACS Nano. -2014. –Vol.8. –p. 1121–1129.
33. Lee S., Kim G., Moon J. Performance improvement of the one-dot lateral flow immunoassay for aflatoxin B1 by using a smartphone-based reading system// Sensors (Basel). -2013. –Vol. 13. –p. 5109–5116
34. Ozcan A. etc. Integrated rapid-diagnostic-test reader platform on a cellphone // Lab Chip. -2012. – Vol. –P. 2678–2686.
35. Mavandadi S. etc. Distributed medical image analysis and diagnosis through crowd-sourced games: a malaria case study // PLoS One. – 2012. –Vol. 7. – P. 372-401

36. Cardoso L.P.V. etc. Development of a quantitative rapid diagnostic test for multibacillary leprosy using smart phone technology // BMC Infect. Dis. – 2013. – Vol. 13. – P. 497–507.
37. Yun .S. etc. Meta-Analysis of First-Line Triple Therapy for Helicobacter pylori Eradication in Korea: Is It Time to Change? // J. Korean Med. Sci. – 2014. – Vol.2. –P. 8–11.
38. He P. etc. Label-free electrochemical monitoring of vasopressin in aptamer-based microfluidic biosensor // Anal. Chim. Acta. – 2013. –Vol.759. –P. 74–80
39. Erickson D. A smartphone platform for the quantification of vitamin D levels // Lab Chip. -2014. –Vol. 14. –P. 1437–1446
40. Rayendran V.K., Bakthavathsalam P., Ali B.M.J. A portable smart-phone device for rapid and sensitive detection of E. coli O157:H7 in Yoghurt and Egg // Microchim. Acta. – 2014. –Vol.181. –P.1815–1821.
41. Ozcan A. etc. Albumin testing in urine using a smart-phone // Lab Chip. - 2013. Vol. 13. - P. 4231–4238.
42. Dealney J.J. etc. Electrogenated chemiluminescence detection in paper-based microfluidic sensors // Anal. Chem. – 2011. –Vol. 83. –P. 1300–1306
43. Doeven E.H. Annihilation electrogenerated chemiluminescence of mixed metal chelates in solution: modulating emission colour by manipulating the energetics // Chem. Sci. -2015. –Vol. 216. –P. 608–613.
44. О специальной оценке условий труда. Федеральный закон от 28.12.2013 N 426-ФЗ.
45. ГОСТ 12.1.007-76* ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности. - М.: Госстандарт СССР, 1985 – 7 с.
46. ГН 2.2.5.1313-03. Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в воздухе рабочей зоны. – М.: Безопасность Труда и Жизни, 2007 – 161 с.
47. Генеральное соглашение между общероссийскими объединениями профсоюзов, общероссийскими объединениями работодателей и Правительством Российской Федерации на 2014 - 2016 годы.
48. ГОСТ 12.4.113-82. Система стандартов безопасности труда. Работы учебные лабораторные. Общие требования безопасности. Введ. : 01.07.83. - М. : Издательство стандартов , 1982 - 5 с.
49. ГОСТ 12.0.003-82. Система стандартов безопасности труда. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация. Введ. : 01.01.1976. - М : Издательство стандартов, 1984 - 4 с.
50. ГОСТ 12.1.005-88. Система стандартов безопасности труда. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны .- Введ. : 01.01.89. - М.: Издательство стандартов , 1991 - 75 с.
51. ГОСТ Р 12.4.233-2007. ССБТ. Средства индивидуальной защиты органов дыхания. Термины и определения. - М., ИПК Издательство стандартов, 2000 – 7 с.

- 52.ГОСТ 12.1.019-79. ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты. - М.: ИПК Издательство стандартов, 2001 – 7 с.
- 53.ГОСТ Р 52319-2005. Безопасность электрического оборудования для измерения, управления и лабораторного применения. Общие требования. - М.: Стандартинформ, 2006 – 96 с.
- 54.ГОСТ 12.1.004-91. ССБТ. Пожарная безопасность. Общие требования. М.: Стандартинформ, 2006 – 68 с.
- 55.ГОСТ 12.1.010-76. ССБТ. Взрывобезопасность. Общие требования. М.: Издательство стандартов, 1996 – 7 с.
- 56.Об отходах производства и потребления. Федеральный закон от 24.06.1998 N 89-ФЗ (ред. от 25.11.2013).
- 57.Приказ Минздравсоцразвития РФ от 11.08.2011 N 906н «Об утверждении Типовых норм бесплатной выдачи специальной одежды, специальной обуви и других средств индивидуальной защиты работникам химических производств, занятым на работах с вредными и (или) опасными условиями труда, а также на работах, выполняемых в особых температурных условиях или связанных с загрязнением».
- 58.Приказ Минздравсоцразвития России от 17.12.2010 N 1122н (ред. от 07.02.2013) «Об утверждении типовых норм бесплатной выдачи работникам смывающих и (или) обезвреживающих средств и стандарта безопасности труда «Обеспечение работников смывающими и (или) обезвреживающими средствами».
- 59.Приказ Минздравсоцразвития РФ от 16.02.2009 N 45н (ред. от 19.04.2010) «Об утверждении норм и условий бесплатной выдачи работникам, занятым на работах с вредными условиями труда, молока или других равноценных пищевых продуктов, Порядка осуществления компенсационной выплаты в размере, эквивалентном стоимости молока или других равноценных пищевых продуктов, и Перечня вредных производственных факторов, при воздействии которых в профилактических целях рекомендуется употребление молока или других равноценных пищевых продуктов».
- 60.Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 02.04.2014).
- 61.Приказ Минздравсоцразвития России от 12.04.2011 N 302н (ред. от 15.05.2013) «Об утверждении перечней вредных и (или) опасных производственных факторов и работ, при выполнении которых проводятся обязательные предварительные и периодические медицинские осмотры (обследования), и Порядка проведения обязательных предварительных и периодических медицинских осмотров (обследований) работников, занятых на тяжелых работах и на работах с вредными и (или) опасными условиями труда».
- 62.О трудовых пенсиях в Российской Федерации. Федеральный закон от 17.12.2001 N 173-ФЗ (ред. от 28.12.2013).

Приложение А
(обязательное)

**Study of coloring conditions after analytical reactions in
polymethylmethacrylate**

- 1.4.1 Analytical chemical application of the optical sensors
- 1.4.2 Digital color analysis
- 1.4.3 Polymer sensors
- 1.4.4 Review and prospects

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ6А	Уразов Эльдар Валентинович		

Консультант – лингвист отделения ИЯ ШБИП:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ст. преподаватель	Рыманова И.Е.	-		

1.4.4 Review and prospects

In [19], Shishkin's group demonstrate that digital image analysis of a scanned microplate image can substitute for a spectrophotometer for several common quantitative microscale procedures. This finding allows for cost effective and microscale quantification of several compounds to be demonstrated in the laboratory. Additionally, popular teaching and learning activities such as water quality monitoring can now be performed accurately and inexpensively using digital image analysis. Another technique of using a desktop scanner and digital image-processing software for the numerical evaluation of the color intensity of substances adsorbed on polyurethane foam was studied. The method is based on scanning colored samples of polyurethane foam using a desktop scanner, processing the color images using Adobe Photoshop as a graphics editor, and building calibration plots of the luminosity of the selected channel (R, G, or B) as a function of the concentration of the test compound using the Origin software. The advantages of the method are its high performance, rapidity, and the possibility of mathematical processing of the results. It has been found that substances adsorbed on polyurethane foam can be determined with the use of a scanner and the corresponding image-processing software with the same sensitivity as with the use of diffuse-reflectance spectroscopy.

The using office scanners, digital cameras, and computer data processing in different colorimetric coordinate systems (RGB, CMYK, LAB, and HSV) is shown in [20]. Polymeric azodye was obtained by an azocoupling reaction between diazotized polyurethane foam (PUF) with 3-hydroxy-7,8-benzo-1,2,3,4-tetrahydroquinoline. The analytically important colorimetric coordinates in these systems were revealed and compared and the coordinates that result in the maximum sensitivity of nitrite determination were chosen. It was shown that calibration curves of the colorimetric coordinates versus concentration of nitrite in aqueous solution can be described by a first order exponent. The detection limits of nitrite (1–3 ng/ml) were achieved in the RGB and CMYK colorimetric systems.

The ubiquitous distribution and international connectivity of smartphones is changing the concept of mobile health and promising to reshape the sensor application area. Smartphone-based sensors have been explored using different approaches, either using the smartphone as detector or as instrumental interface. Smartphone-based biosensors have great potential as point-of-care and point-of-need platforms for healthcare, food safety, environmental monitoring, and biosecurity, especially in remote and rural areas.

To use smartphone as a detector there is a need smartphone to couple with an apparatus that contains the components of an instrument in a simplified format. The smartphone camera is used to detect the output signal. An elegant example was reported by Breslauer et al., who developed a microscope attached to a smartphone for both bright-field and fluorescence imaging [21]. The system comprises different elements integrated into a compact apparatus. In particular, for fluorescence imaging, the system includes a standard microscope eyepiece, an emission filter, an objective, a condenser lens, an excitation filter, a collector lens, and a Light Emitting Diode (LED) as excitation source (Fig. 1). Removing the filters and LED, the apparatus becomes a bright-field microscope. The authors demonstrated the applicability of this device for clinical diagnostics by capturing bright-field high-resolution images of *P. falciparum* malaria-infected blood samples and fluorescent images of Auramine-Ostained *M.-tuberculosis*-positive sputum smears. These tests are currently performed with standard microscopes.

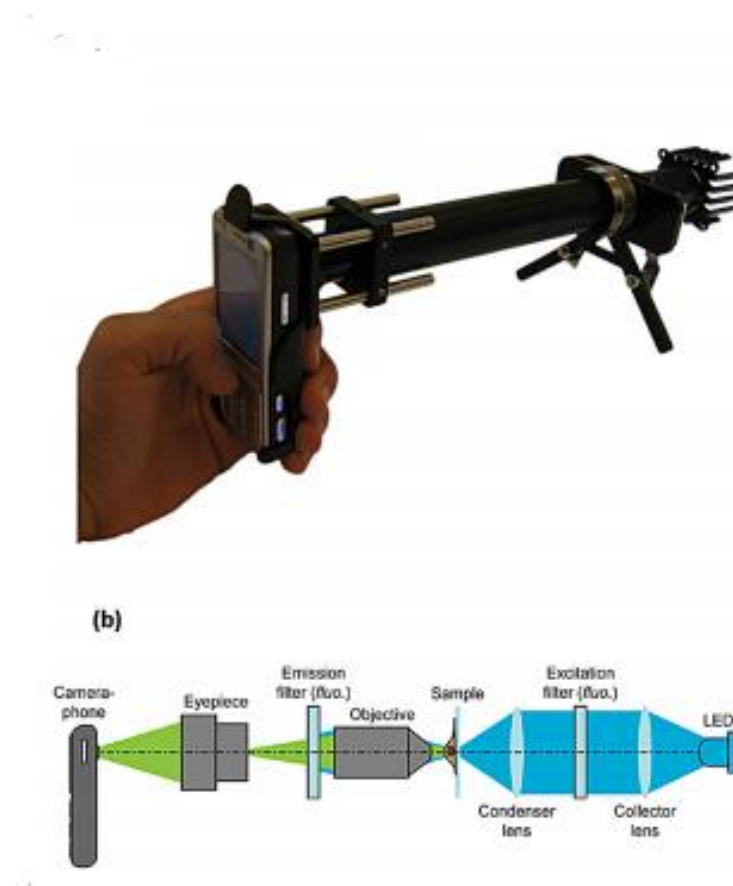


Figure 2. A current prototype, with filters and LED installed, capable of fluorescence imaging and (b) cellphone microscopy optical layout for fluorescence and bright-field imaging (components required for fluorescence imaging only are indicated by ‘fluo’).

However, the authors demonstrated that microscope imaging is also possible with conventional smartphone camera technology. This is because the camera’s high resolution is adequate for imaging blood cell and microorganism morphology. The concept could be used to overcome the issue of limited access to clinical microscopy in developing and rural areas, where clinical laboratories are scarce but cellphone infrastructure is extensive.

In [14], a smartphone based optical platform for colorimetric analysis of blood hematocrit using a disposable microfluidic device is designed, implemented and fully characterized. Using an integrated camera in the smartphone, pictures of

human blood in the microchannel were taken and analyzed by a mobile application. To avoid the image burning and ambient light effect, a unique light-diffusing model inside a white acrylic-imaging box was included in this platform (fig.3). With the image-processing program on the smartphone, the developed device was successfully applied to determine various hematocrit levels of human blood from 10% to 65%. Furthermore, the characterization of the depth of the microfluidic channel demonstrated that a shallower depth of the microchannel enhanced the sensitivity of the hematocrit determination

Tseng et al. reported a smartphone-based lens-free digital microscope that does not use lenses, laser, or other optical components, greatly simplifying the system architecture [23]. The authors used an LED to vertically illuminate the sample area. When it interacts with the sample, the LED light is scattered and refracted. The light waves that pass through the sampled objects (e.g. cells) interfere with the unscattered light, creating a hologram of each object, which is detected using the smartphone camera. The authors demonstrated the system's performance by imaging various sized microparticles, red and white blood cells, platelets, and a parasite.

This lens-free smartphone microscope has several important features, including compactness, lightness (38 g), and cost-effectiveness, which make it very suitable for decentralized point-of-need use, particularly in developing areas. On the other hand, the spatial resolution of images is limited by the pixel size at the sensor, making the system less accurate than a standard microscope. In addition, obtaining real images requires a holographic reconstruction algorithm, which cannot reasonably be installed on the smartphone because it would drastically reduce its speed. This implies that the holographic reconstruction process must be performed remotely, e.g. in a central hospital. Using a tablet with a larger screen could also be very useful, particularly when the image of the target is relevant for diagnosis. For standard use, a simple cellphone could be used even if it has a small screen.

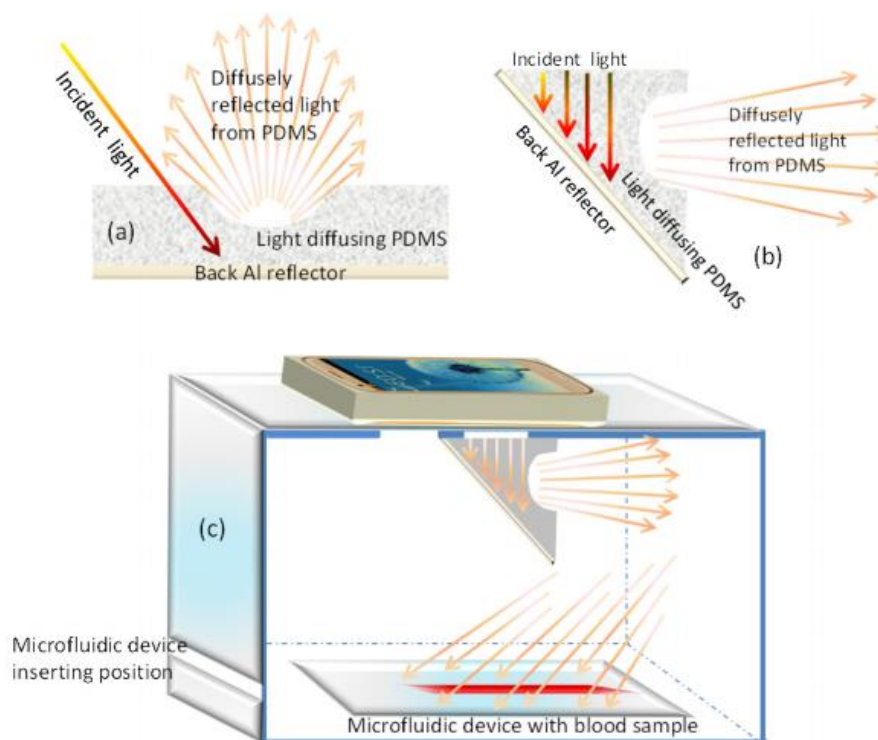


Figure 3. (a) Light diffusing effect from a U-shaped PDMS placed on a reflecting aluminum (Al) back contact, (b) PDMS diffuser used in optical model on the reflecting aluminum (Al) back contact, and (c) Schematic side view of light diffusion effect from a PDMS media on the disposable microfluidic device.

The development of standalone smartphone-based sensors allows the advantages of the smartphone to be fully exploited. These qualify as real sensors if they can be used to perform the entire analytical process, from analysis to data acquisition and elaboration. In such cases, the smartphone is not auxiliary, but rather forms the core of the analytical platform. Several works have been reported in which different detection principles have been used to develop smartphone-based sensors that do not need additional devices.

Color-based sensing has attracted much attention because of its low cost, simplicity, and practicality [24]. It produces visual results and is usually stable, inexpensive, and simple to perform. Smartphone cameras use low-cost CMOS arrays, which respond to red, green, and blue (RGB) light. These cameras integrate a range of automated functions, such as Auto White Balance (AWB), which is designed to provide good color reproduction by adjusting the detected RGB signals

at different ratios. An increasing number of mobile apps have been developed for photo editing, RGB color analysis, and image processing. These apps allow the analysis of digital images and the collection of quantitative data, by measuring color changes and intensities. Theoretically, these sensors have relatively low sensitivity and are therefore applicable for analytes present in relatively high concentrations in biological fluids and environmental and food samples. Although smartphones have integrated colorbalancing functions, the smartphone camera is optimized for photography in high ambient light, and it is hard to control lighting conditions during imaging. This is especially true outside of controlled environments, such as laboratories, and so it is difficult to perform accurate quantitative measurements. Furthermore, analyzing the images is not always easy, especially when there are small changes in color. In these cases, it is not always possible to use the RGB space. Instead, an alternative, such as HSV or CIE, must be used. For all these reasons, when developing colorimetric tests to integrate with smartphones, phone-specific external housing units are often required. These units eliminate the variation in lighting conditions and camera positioning. Dedicated software and additional components, such as batteries, LED arrays (for reflection and transmission), and lenses, can further overcome these limitations and allow accurate measurements to be performed.

Ozcan's research group presented a smartphone-based device for quantifying mercury (II) ions in water, using a plasmonic gold nanoparticle (AuNPs) and aptamer colorimetric transmission assay [22]. Thymine-rich sequence aptamers (5'-TTTTTTTTTT-3') have a strong affinity for AuNPs and form a protective layer on the surface of nanoparticles, which prevents them from aggregating. In the presence of mercury (II) ions, aptamers form a more stable complex T-Hg²⁺-T. The change of ratio between transmitted light at two wavelengths (523 nm, green and 625 nm, red) is thus related to AuNPs aggregation. This is used to quantify mercury ion concentration (LOD ~ 3.5 ppb), using a two-color ratiometric detection method. The smartphone accessories are: two battery-alimented LEDs emitting light at 523 nm (green) and 625 nm (red) to follow the shift in the

extinction wavelengths of the dispersed and aggregated AuNPs, respectively; a light diffuser; a chamber for sample and control cuvettes; and an external lens to converge transmitted light and focus two color images. A custom-designed Android app was developed to capture the colorimetric transmission image of the sample, then digitally analyze and process it. The LOD of this smartphone-based dual-color ratiometric platform is more than six times better than the LOD of the exact same assay measured by a portable UV-vis spectrometer (Ocean Optics, HR2000+) (LOD ~ 24.6 ppb).

The same group developed a transmittance-based (wavelength 650 nm) assay integrated into a smartphone-based testing platform (termed iTube) to detect and quantify allergen contamination in foods (Fig. 3) [26]. The immunocolorimetric assay is based on a food allergy test kit that is specific to peanuts (Veratox test kit, Neogen). The results obtained are comparable to the commercial standard method ELISA kit performed in the laboratory (working range: 1–25 ppm; assay time: 30 min). This iTube platform consists of a cost-effective opto-mechanical attachment to the cellphone camera unit, plus the test and control tube. This attachment comprises an inexpensive plastic plano-convex lens, two lightemitting diodes (LEDs), whose wavelengths were specifically chosen to match the absorption spectrum of the colorimetric assay performed in the test tube, two light diffusers, and circular apertures to spatially control the imaging field of view. The test and control tubes are activated with an allergenspecific sample preparation and sealed with lids. They are then inserted from the side into the attachment, where the transmission intensities for each tube are acquired using the cellphone camera. These tube images are then digitally processed within one second. A custom-developed smart app installed on the cellphone quantifies the amount of allergen present in the sample.

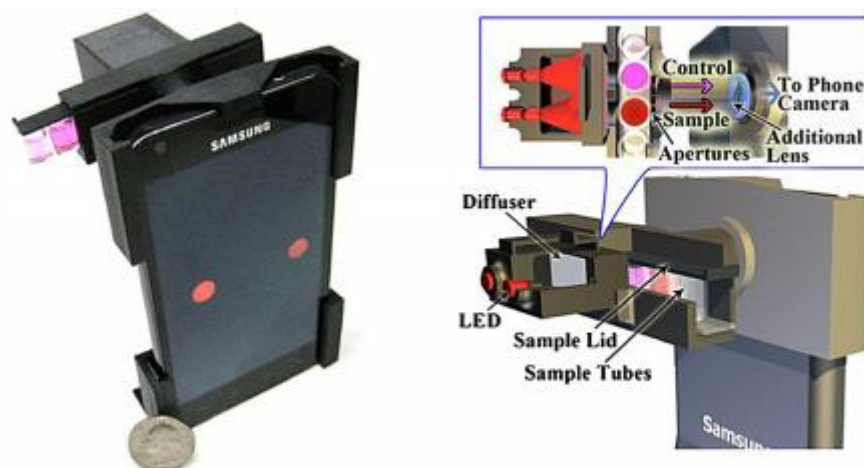


Figure 3. (a) Image of the iTube platform and smartphone screen of colorimetric assays reading. (b) A schematic illustration of components of the same iTube platform. R

Vashist et al. have recently reported that a very simple smartphone-based colorimetric reader is suitable for detecting immunoenzymatic assays for human C-reactive protein (CRP), performed in conventional microtiter plate format [27]. They reported that the analytical performance is similar to conventional sandwich ELISA and clinically-accredited analyzer-based immunoassays. In all cases, although the analytical performances are in agreement with the results obtained with conventional laboratory methods, the devices will have different limitations when it comes to actual point-of-need application. The use of these sensors by unskilled personnel is made difficult by the complexity of the various device accessories (which often necessitate changing the smartphone's physical and electronic components), the need to use laboratory instruments (such as pipettes) because reactions are performed in solution, the difficulty of storing reagents, and the incubation times.

Other devices use light reflectance to measure an end-point enzymatic reaction. Enzymes specific to a given analyte are immobilized on test strips. The reflected light color intensity of a chromogenic substrate is directly related to the amount of analyte in the biological fluids. For example, Erickson et al. developed and characterized a smartCARD (smartphone Cholesterol Application for Rapid Diagnostics) system [28] (fig.4).



Figure 4. Image of vitaAID accessory on a iPhone with the inset showing the components of the accessory

This device uses dry reagent test strips manufactured by CardioChek (Polymer Technology Systems Inc., IN, USA). The strip is provided with a series of filter papers that separate plasma from red blood cells and direct some of the plasma towards an analyte-specific reaction pad. At that point, cholesterol oxidase enzyme converts total cholesterol and HDL cholesterol to cholest-4-en-3-one and hydrogen peroxide. The peroxide then reacts with disubstituted aniline to form quinone-imine dyes that produce a color change. A smartphone accessory allows uniform and repeatable image acquisition of the test strip, the smartphone flash illuminates the strip, and black PDMS diffuser ensures uniform illumination. An app developed for the iPhone iOS platform analyzes parameters such as hue, saturation, and luminosity of the test area, quantifies the cholesterol levels, and displays the value on the screen. The test results can be imaged using the smartphone's built-in camera, followed by colorimetric analysis. The smartcard device can accurately quantify physiological total cholesterol levels in blood (100–400 mg/dL) within 60s by imaging the standard test strips. It shows similar analytical performances to those of the commercial CardioCheck plus Analyzer (from Polymer Technology Systems, Inc.). Moreover, compared to this portable device, a standard commercial colorimetric kit (EnzyChrom™ AF Cholesterol Assay Kit, from BioAssay System) has a longer assay time (30 min) and, because

of a lower working range (0–100 mg/dL), requires that the sample be pretreated and diluted to quantify cholesterol in serum.

Erickson's group also developed a strip-based reflectance test integrated with a smartphone accessory to monitor pH changes in sweat and saliva [29]. This system comprises a smartphone case, an app, and disposable strips. The pH is determined by checking the Hue value (HSV space) – with pH correlation stored inside the app. Smartphone-based test reader platforms of different formats based on lateral flow immunochromatographic assays have been reported [30-33]. Various types of test strips can be inserted into the accessory device attached to the smartphone. The smartphone camera then acquires an image, which is analyzed and processed by a dedicated app. Erickson's group developed one example of a colorimetric LFIA smartphone device [34]. This system (vitaAID) can rapidly quantify vitamin D levels by evaluating serum samples with an LFIA test strip. This test strip allows colorimetric detection of 25-hydroxyvitamin D using a gold-nanoparticle-based immunoassay. The vitaAID system can measure physiological levels of 25(OH)D (working range: 15–110 nM) within approximately 6 hours. This long assay time is due to the critical step of incubating AuNP-anti25(OH)D on the test strip. The results obtained are comparable with those of a commercial ELISA kit (from ALPCO, USA). However, although the commercial kit has a wider working range (12–240 nM), it takes longer to provide results (approximately 22 hours of overnight incubation at 8–10°C). These systems have several characteristics relevant to POC applications. They are user-friendly, low-cost (paper is inexpensive and readily available), fully self-contained, portable, and require a low volume of serum (a few microliters). Results can be interpreted easily by semiskilled technicians. Thanks to the wide variety of reagents already developed and tested for colorimetric assays, many different analytes can be measured. Finally, papers of various thicknesses can be used to adjust the method's sensitivity to different ranges of analyte concentration. However, there are also limitations. It is difficult to obtain quantitative information from the change of color. This is due to variability in the amount, intensity, and

brightness of light reflected from the surface where an assay has occurred and the very low homogeneity of color on the detection area. The measurements require high (e.g. millimolar) concentrations of analytes, and are relatively insensitive to trace quantities of analytes. But it is the low (picomolar to micromolar) concentrations of analytes present in biological fluids that are most interesting for clinical applications.

Photoluminescence is another luminescent approach to developing sensitive smartphone-based sensors. The main challenge here is the complexity of the requisite instrumentation, which includes an optical module comprising a light source, optical filter, and lens. The measurement cell must also meet specific geometrical and transparency requirements. Despite these limitations, fluorescence is widely used as a detection principle in smartphone-based sensors due to its high sensitivity. Rajendran et al. coupled LFIA technique with smartphone-based technology to exploit fluorescence detection [35]. Silica nanoparticles (SiNPs) doped with FITC and conjugated to the respective antibodies were used in a conventional LFIA to detect the foodborne bacterial pathogens, *Salmonella* and *Escherichia coli* O157. Fluorescence was recorded by inserting the nitrocellulose strip into a smartphone-based fluorimeter. This fluorimeter comprised a lightweight optical module containing an LED light source, a fluorescence filter set, and a lens attached to the integrated smartphone camera, which acquired high-resolution fluorescence images. The images were analyzed using a rapid image-processing smartphone app, allowing analyte detection in just a few minutes.

Ozcan's group developed another portable smartphone-based device for fluorescent detection [36]. They developed an albumin tester to measure albumin concentration in urine samples using a sensitive and specific fluorescent assay performed in a disposable test tube.

There are few examples of electrochemiluminescence (ECL) coupled with smartphone-based detection. This is despite the widespread diffusion of this technique for conventional biosensors and for general clinical chemistry immune

and gene probe automatic stations. An early example was presented by Delaney et al., who developed a microfluidic paper-based analytical device (or μ -PADs) using a smartphone camera as an ECL detector [37]. Using inkjetprinted paper, fluidic substrates, and screen-printed electrodes, they constructed very low-cost disposable ECL sensors, which may be read with a smartphone camera.

Doeven et al. developed a low-cost system to generate, control, and detect ECL using a smartphone [38]. A simple tone-detection integrated circuit was used to switch power from the phone's Universal Serial Bus (USB) 'On-The-Go' (OTG) port, using audible tone pulses played over the device's audio jack. The smartphone camera was then used to measure the emitted light. They compared the performances of an electrochemical cell controlled by the smartphone with those obtained using a conventional potentiostat. They then used this approach to explore the ECL properties of a watersoluble iridium(III) complex, which emits in the blue region of the spectrum.

References

1. Gründler P. Chemical sensors: an introduction for scientists and engineers. – Berlin: Springer. 2007. –P. 274 .
2. Kattrall R. W. Chemical sensors. Oxford University Press. 1997. –P.80
3. Mohr G. J.. Materials and Polymers in Optical Sensing // J. Proc. R. Inst. Chem. - 2002, P. 201-219.
4. Wang C. etc. Effects of additives on PVC plastics surface and the natural flotability, colloids and Surfaces // Colloids Surf., A. – 2014. - Vol. 441. P.-544-548.
5. C. McDonagh. Optical Chemical Sensors // Chem. Rev. – 2008. - Vol. 108. - P. 400-422
6. Li Y.S. etc. Introduction to colorimetry // J. Soc. Dyers Colour.– 1999. - Vol. 115. - P. 95
7. Deo H.T., Desai B.K. Study of color properties // J. Soc. Dyers Colour.– 1999. - Vol.115. p. 224
8. Gillchrist A., Nobbs J. Optical world //J. Soc. Dyers Colour. – 2007. - Vol. - 115. - P.14
9. Martins A. R., Paciornik S., Pereira J. A. S. Proceedings of IMEKO 2000 /// Int.J. Metrol. Qual. Eng. – 2000. - Vol. 9. - P.121-126
- 10.Химченко С., Экспериандова Л. Сравнение аналитических возможностей вариантов детектирования в цветометрическом экспресс-анализе с помощью портативных инструментов // Ж. анал. хим. – 2012. – Т. 67. - № 8. - С. 777–781
- 11.Miller J.C., Miller J.N. Statistics for Analytical Chemistry. - Pearson Education Canada. 1993. – P.296
- 12.Mohr G. J. Polymers for optical sensors. - Dodrecht: Springer. 2008. - P. 297-321.
- 13.Collision M. M., Howels A. R. Chemical Sensor // Anal. Chem. – 2000. – Vol. 39. – P. 600-618.
- 14.Золотов Ю.А., Иванов В.М., Амелин В.Г. Химические тест – методы // Ж. анал. хим. – 2002. — С. 197-204
- 15.Золотов Ю.А., Цизин Г.И., Моросанова Е.И., Дмитриенко С.Г. Сорбционное концентрирование микрокомпонентов для целей химического анализа // Усп. хим. – 2005. – Т. 74. – №1. – С.41-66.
- 16.Gavrilenko N.A., Saranchina N.V. Analytical properties of 1-(2-pyridylazo)-2-naphthol immobilized on a polymethacrylate matrix // J. Anal. Chem. – 2009. –Vol.69. –P. 226-230.
- 17.Gavrilenko N.A etc. Redox and acid-base properties of 2,6-dichlorophenolindophenol immobilized on a polymethacrylate matrix // J. Anal. Chem. – 2010. – Vol. 65. –P. 17-20.
- 18.Kim C. etc. A smartphone-based optical platform for colorimetric analysis of microfluidic device // Sens. and Act. Chem. – 2016. – P.239.

19. Shishkin Y.L., Dmitrienko S.G., Medvedeva O.M. Use of a Scanner and Digital Image-Processing Software for the Quantification of Adsorbed Substances // J. Anal. Chem – 2004. – Vol. 59. – P.102
20. Apyari V.V., Dmitrienko S.G., Zolotov Y.A. Polyurethane Foams in Chemical Analysis: Sorption of Various Substances and Its Analytical Applications // M. Univ. Chem. Bull. – 2011. Vol. 66. – P. 32
21. Breslauer D.N. etc. Mobile phone based clinical microscopy for global health applications // PLoS ONE. –2009. - Vol. 4. - P. 632-639
- 22.. etc. Lensfree microscopy on a cellphone // Lab chip – 2010. - Vol. 14. P. 1787–1792
23. Ozcan A. etc. Cellphone-based devices for bioanalytical sciences // Anal. Bioanal. Chem. – 2014. –Vol. 406. – P.3263–3277.
24. Ozcan A. etc. A personalized food allergen testing platform on a cellphone // Lab Chip – 2013. – Vol. 13. – P. 636–640
25. Vashist S.K. etc. Graphene-based rapid and highly-sensitive immunoassay for C-reactive protein using a smartphone-based colorimetric reader // Biosens. Bioelectron. – 2015. –Vol. 66. –P. 166-169
26. Oncescu V., Mancuso M., Erickson D. NutriPhone: a mobile platform for low-cost point-of-care quantification of vitamin B₁₂ concentrations // Lab Chip. -2014. –Vol. –P. 759–763
27. Oncescu V., O'Dell D., Erickson D. Smartphone technology can be transformative to the deployment of lab-on-chip diagnostics // Lab Chip. - 2013. –Vol. 13. –P. 3232–3238
28. Shen L., Hagen J.A., Papautsky I. Design and Development of Aptamer–Gold Nanoparticle Based Colorimetric Assays for In-the-field Applications // Lab Chip. -2012. –Vol. 12. –P. 4240–4243
29. Wei Q. etc. Detection and spatial mapping of mercury contamination in water samples using a smart-phone // ACS Nano. -2014. –Vol.8. –p. 1121–1129.
30. Lee S., Kim G., Moon J. Performance improvement of the one-dot lateral flow immunoassay for aflatoxin B1 by using a smartphone-based reading system// Sensors (Basel). -2013. –Vol. 13. –p. 5109–5116
31. Ozcan A. etc. Integrated rapid-diagnostic-test reader platform on a cellphone // Lab Chip. -2012. – Vol. –P. 2678–2686.
32. Mavandadi S. etc. Distributed medical image analysis and diagnosis through crowd-sourced games: a malaria case study // PLoS One. – 2012. –Vol. 7. – P. 372-401
33. Cardoso L.P.V. etc. Development of a quantitative rapid diagnostic test for multibacillary leprosy using smart phone technology // BMC Infect. Dis. – 2013. – Vol. 13. – P. 497–507.
34. Yun .S. etc. Meta-Analysis of First-Line Triple Therapy for Helicobacter pylori Eradication in Korea: Is It Time to Change? // J. Korean Med. Sci. – 2014. – Vol.2. –P. 8–11.

35. He P. etc. Label-free electrochemical monitoring of vasopressin in aptamer-based microfluidic biosensor // *Anal. Chim. Acta.* – 2013. – Vol. 759. – P. 74–80
36. Erickson D. A smartphone platform for the quantification of vitamin D levels // *Lab Chip.* -2014. – Vol. 14. – P. 1437–1446
37. Rayendran V.K., Bakthavathsalam P., Ali B.M.J. A portable smart-phone device for rapid and sensitive detection of *E. coli* O157:H7 in Yoghurt and Egg // *Microchim. Acta.* – 2014. – Vol. 181. – P. 1815–1821.
38. Ozcan A. etc. Albumin testing in urine using a smart-phone // *Lab Chip.* - 2013. Vol. 13. - P. 4231–4238.
39. Dealney J.J. etc. Electrogenenerated chemiluminescence detection in paper-based microfluidic sensors // *Anal. Chem.* – 2011. – Vol. 83. – P. 1300–1306
40. Doeven E.H. Annihilation electrogenerated chemiluminescence of mixed metal chelates in solution: modulating emission colour by manipulating the energetics // *Chem. Sci.* -2015. – Vol. 216. – P. 608–613.